

Wilfredo Tomaselli

**ESTUDO DE PROBLEMAS DE MINIMIZAÇÃO DE
FUNÇÕES QUADRÁTICAS COM RESTRIÇÃO
DE BOLA OU DE VARIEDADE LINEAR**

**Curitiba
2006**

Wilfredo Tomaselli

**ESTUDO DE PROBLEMAS DE MINIMIZAÇÃO DE
FUNÇÕES QUADRÁTICAS COM RESTRIÇÃO
DE BOLA OU DE VARIEDADE LINEAR**

Dissertação apresentada ao Departamento de
Matemática da Universidade Federal do Paraná
como parte dos requisitos parciais à obtenção do
título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientadora: Prof. Dr^a. Elizabeth Wegner Karas.
Co-orientador: Prof. Dr. Ademir Alves Ribeiro.

**Curitiba
2006**

TERMO DE APROVAÇÃO

Wilfredo Tomaselli

ESTUDO DE PROBLEMAS DE MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES QUADRÁTICAS COM RESTRIÇÃO DE BOLA OU DE VARIEDADE LINEAR

Dissertação aprovada como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada, Departamento de Matemática, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:

Orientadora: _____

Prof^a. Dr^a. Elizabeth Wegner Karas
Departamento de Matemática, UFPR

Prof. Dr. Ernesto Julián Goldberg Birgin
Departamento de Ciência da Computação, USP

Prof. Dr. José Renato Ramos Barbosa
Departamento de Matemática, UFPR

Curitiba, 24 de Março de 2006.

*Nada no mundo pode substituir a persistência.
O talento não pode; nada mais comum que pessoas mal-sucedidas com talento.
A genialidade não pode; gênios não recompensados é quase um provérbio.
A educação não pode; o mundo esta cheio de cultos desamparados.
Apenas a persistência e a determinação são onipotentes.
O lema ‘segue adiante’ resolveu e sempre resolverá os problemas da raça humana.*

Calvin Coolidge (1872-1933), político norte-americano.

Agradecimentos

1. Aos meus pais, Valério e Áurea, e à minha irmã, Francine, pela atenção, carinho e apoio que me deram em vários momentos da minha vida.
2. Ao professor José Renato Ramos Barbosa, por ter-me estimulado a direcionar meus estudos para a área de Matemática.
3. A meus orientadores acadêmicos, professores Elizabeth Wegner Karas e Ademir Alves Ribeiro, pelo constante incentivo e pela presteza – e paciência – em ajudar-me a produzir este trabalho.
4. À colega de seminários Alessandra Machado da Mota, por ter acompanhado parte da empreitada.
5. Ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, por ter-me acolhido e por ofertar todas as oportunidades para eu poder executar e concluir esta árdua e gratificante atividade de pesquisa.

Resumo

Neste trabalho estudamos as relações entre problemas quadráticos particulares.

Os problemas quadráticos são muito estudados em programação não linear pelo grande número de aplicações que recaem nesse tipo de problema. Eles freqüentemente são usados como subproblemas auxiliares nos algoritmos mais gerais.

No estudo de métodos de resolução de problemas de programação não linear, aparecem dois importantes problemas quadráticos que envolvem uma variedade linear e uma bola fechada. Relacionado a eles há um problema geométrico. A meta deste trabalho é caracterizar as soluções de cada problema e estabelecer os vínculos existentes entre elas. A análise das relações entre tais problemas e suas soluções representa a principal contribuição da dissertação.

Palavras-chave: *programação não linear; problemas quadráticos; algoritmos.*

Abstract

In this work we study the relations between particular quadratic problems.

Quadratic problems are studied in nonlinear programming since the great number of applications. These problems are frequently used as auxiliary subproblems from general algorithms.

By studying methods for nonlinear programming one can get two important quadratic problems which involve a linear manifold and a closed ball. Related to those problems there is a geometric problem. The main goal of this work is to characterize the solutions of each problem and discuss the relationship between them.

Key words: *nonlinear programming; quadratic problems; algorithms.*

Sumário

Introdução	1
1 Conceitos básicos	4
1.1 Notação de índices e de matrizes	4
1.2 Aplicação	5
1.3 Espaço \mathbb{R}^n	5
1.3.1 Vetor	6
1.4 Produto interno, norma, projeção ortogonal e distância	8
1.5 Vizinhanças e bolas	8
1.6 Subespaços vetoriais	10
1.6.1 Subespaços ortogonais	10
1.7 Singularidade, autovalores e autovetores	12
1.8 Matrizes simétricas definidas	13
1.9 Funções em \mathbb{R}^n	14
1.10 Variedades lineares	15
1.10.1 Hiperplanos	20
1.10.2 Variedades lineares associadas a uma matriz e a um vetor . . .	23
2 Programação não linear	27
2.1 O problema de programação não linear	27
2.2 Solução do problema	28
2.3 Condições de qualificação e de otimalidade	29
2.4 Algoritmos	31
2.4.1 Algoritmos iterativos	31
2.4.2 Algoritmos de decréscimo	32
2.4.3 Critérios de parada	33

2.5	Problemas irrestritos	34
2.5.1	Os métodos de região de confiança	35
2.6	Problemas com restrições	38
2.6.1	Programação quadrática seqüencial	39
2.6.2	Restauração inexata	48
3	Problemas quadráticos	52
3.1	O problema quadrático	52
3.2	Problemas quadráticos irrestritos	53
3.2.1	Problema dos quadrados mínimos discreto	54
3.2.2	Método do gradiente conjugado	57
3.3	Problemas quadráticos em uma bola	62
3.3.1	Método <i>dogleg</i>	64
3.3.2	Aproximação de Steihaug	65
4	Problemas com uma bola e uma variedade linear	68
4.1	Formulação dos problemas	69
4.2	Problema (P1)	69
4.2.1	Caracterização da solução	71
4.2.2	Problema equivalente	74
4.2.3	Hiperplano associado ao problema	75
4.3	Problema (P2)	79
4.3.1	Caracterização do problema	79
4.3.2	Solução	82
4.4	Problema (P3)	84
4.4.1	Problema equivalente	85
4.4.2	Problemas irrestritos associados	85
4.4.3	Caracterização das soluções	87
4.5	Relações entre as soluções dos três problemas	89
4.5.1	Interpretação geométrica	93
4.5.2	Exemplos	96
	Conclusões	100
	Referências Bibliográficas	103

Introdução

O trabalho está inserido na área de otimização contínua, mais especificamente no estudo de problemas de programação não linear. Essa área trata do estudo de problemas de otimização de funções de várias variáveis que possuem restrições no seu domínio. Ela visa estabelecer as propriedades dos problemas, caracterizar as soluções e definir algoritmos para encontrar uma ou mais soluções.

A forma mais comum de problemas de programação não linear é

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s. a} \quad & f_E(x) = \bar{0} \\ & f_I(x) \leq \bar{0} \end{aligned}$$

onde $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é a função objetivo a ser minimizada, e $f_E : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ e $f_I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m-p}$ são as funções relacionadas às restrições de igualdade e desigualdade, respectivamente. Os pontos que satisfazem as restrições são os pontos viáveis.

A partir dos conceitos de minimizador local e global, é possível definir como solução de um problema um minimizador local da função objetivo. Os métodos de programação não linear são construídos de forma a obter um ou mais pontos que satisfaçam os critérios necessários para eles serem soluções do problema.

Do ponto de vista matemático, segundo Luenberger [12], os algoritmos são uma função que associa cada ponto de um espaço a um subconjunto não vazio do espaço. De modo geral, algoritmos dessa forma constituem no cerne de uma classe bastante importante de algoritmos, os iterativos. Em um algoritmo iterativo, uma sequência de pontos é obtida a partir de um conjunto de operações ordenadas e estabelecidas sobre os pontos anteriores. Tais operações definem o passo iterativo, que associa a cada ponto, ou a alguns dos pontos anteriores da sequência, um conjunto a partir do qual o próximo ponto da sequência é determinado.

Conceitualmente, as iterações de um processo iterativo são executadas até

se obter uma solução. Contudo, isso pode significar gerar uma seqüência infinita de pontos ou uma demanda de tempo não aceitável para se chegar a uma solução exata. Na implementação computacional dos algoritmos iterativos, muitas vezes é necessário estabelecer um ou mais critérios de parada, de forma que o algoritmo termine em um ponto considerado de alguma forma próximo da solução desejada.

Em geral, os métodos de programação não linear constituem-se de algoritmos iterativos que, a partir de um ponto inicial, viável ou não, geram uma seqüência de pontos de forma a obter uma solução em alguma iteração, ou então geram uma seqüência infinita cujos pontos de acumulação são soluções. Conforme o problema, podem ser adotados diferentes critérios para determinar se um ponto é uma solução. São os critérios de otimalidade. Para um ponto poder ser avaliado pelo critério de otimalidade, ele deve possuir certas propriedades, chamadas de critérios de qualificação.

Para problemas irrestritos, as técnicas clássicas de resolução são algoritmos iterativos que buscam, a cada iteração, uma direção a partir do ponto corrente que permite diminuir o valor da função objetivo. Já os métodos de região de confiança [5] obtêm uma solução através de uma seqüência de subproblemas. A cada iteração, a função objetivo é modelada por uma função quadrática cujos valores são próximos dos da função objetivo em uma determinada vizinhança em torno do ponto corrente; após a modelagem, é obtido um ponto na vizinhança que minimiza o modelo da função objetivo.

Segundo Friedlander [8], há três grandes classes de métodos para resolver problemas com restrições: penalidade ou barreira; programação quadrática seqüencial; e gradiente reduzido generalizado. Os métodos de penalidade ou barreira [16] são processos iterativos que resolvem, a cada iteração, um problema irrestrito cuja função objetivo é a função objetivo original acrescida de uma outra função construída a partir das restrições – a penalidade ou barreira. A programação quadrática seqüencial [3, 4] é uma abordagem para a resolução de problemas com restrições em que a cada iteração é resolvido um subproblema quadrático. Uma descrição dos métodos de gradiente reduzido generalizado pode ser encontrada em [12].

Os problemas quadráticos são muito estudados em programação não linear. Eles aparecem em vários algoritmos mais gerais como subproblemas a serem resolvidos em uma ou mais iterações, constituindo muitas vezes o passo iterativo do algoritmo. Os casos mais freqüentes de problemas quadráticos são os irrestritos e os

com restrição de bola fechada. Um exemplo de problema quadrático importante na literatura é o problema dos quadrados mínimos. Uma das técnicas existentes para resolver problemas quadráticos irrestritos é o método do gradiente conjugado [7]. Para problemas quadráticos em bolas [16], há dois métodos bastante utilizados para obter uma solução aproximada: *dogleg* e aproximação de Steihaug.

Nos estudos sobre problemas de programação não linear, aparecem dois importantes problemas envolvendo uma variedade linear e uma bola fechada. Associado a eles há um problema geométrico. Esses três problemas são o enfoque principal deste trabalho. O propósito é caracterizar as soluções de cada problema e estabelecer os vínculos existentes entre elas. O primeiro problema corresponde a achar o ponto de menor norma euclidiana de uma variedade linear. Também pode ser visto como a projeção ortogonal da origem O na variedade linear. A solução do problema é sempre única. O segundo problema significa encontrar o ponto da bola fechada de menor distância euclidiana a uma variedade linear. O terceiro problema consiste em minimizar a norma euclidiana de um resíduo linear sujeito a uma restrição de bola fechada. A análise das relações entre os três problemas e suas soluções constitui na principal contribuição deste trabalho.

Capítulo 1

Conceitos básicos

Neste capítulo apresentamos alguns conceitos básicos de Álgebra Linear [10, 11] utilizados ao longo do trabalho. As proposições enunciadas neste capítulo apresentam as propriedades mais relevantes usadas nos demais capítulos. A discussão feita sobre variedades lineares e hiperplanos [12] na Seção 1.10 permite uma melhor compreensão dos problemas de programação não linear tratados no Capítulo 4. Abordamos a interpretação geométrica das definições e propriedades referentes ao conjunto \mathbb{R}^n .

1.1 Notação de índices e de matrizes

Neste trabalho, os vetores e as matrizes são denotados respectivamente por letras minúsculas e maiúsculas. Vetores e pontos diferentes são indexados por superíndices. Subíndices denotam os componentes de um vetor. Escalares, matrizes e conjuntos distintos são indexados por subíndices. O espaço $\mathbb{R}^{m \times n}$ é o conjunto das matrizes de m linhas e n colunas com as entradas (i, j) sendo números reais. A transposta de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é denotada por A^T . Para qualquer n natural, a matriz identidade de $\mathbb{R}^{n \times n}$ é denotada por I . Quando u e v são vetores, a notação $u > v$ significa que, para cada componente i dos dois vetores, vale $u_i > v_i$. As notações $u \geq v$, $u < v$ e $u \leq v$ possuem significado similar. As demais notações são apresentadas ao longo do trabalho.

1.2 Aplicação

Dado um conjunto X , o *conjunto das partes* de X é o conjunto $\mathcal{P}(X)$ definido como

$$U \subset X \iff U \in \mathcal{P}(X).$$

Desse modo, $\mathcal{P}(X)$ é a família de subconjuntos do conjunto X . Para qualquer conjunto X , temos que $\emptyset, X \in \mathcal{P}(X)$.

Uma *aplicação ponto-a-conjunto*, ou simplesmente *aplicação*, em um conjunto X é uma função $\mathcal{A} : X \rightarrow \mathcal{P}(X)$.

1.3 Espaço \mathbb{R}^n

Para um número natural n , o conjunto de matrizes coluna reais

$$\mathbb{R}^n = \left\{ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} ; x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R} \right\}$$

é o *espaço* \mathbb{R}^n , e está associado a um espaço geométrico. Um elemento do conjunto \mathbb{R}^n é um *ponto* do espaço. O ponto $O = [0 \ 0 \dots 0]^T$ é a *origem* do espaço \mathbb{R}^n .

Dados dois pontos $x, y \in \mathbb{R}^n$, o conjunto

$$r = \{z \in \mathbb{R}^n \mid z = x + \alpha(y - x) ; \alpha \in \mathbb{R}\}$$

é a *reta* definida pelos dois pontos. O *segmento de reta fechado*, ou *intervalo fechado*, definido pelos pontos x e y é dado por

$$[x, y] = \{z \in \mathbb{R}^n \mid z = x + \alpha(y - x) ; 0 \leq \alpha \leq 1\}.$$

O *segmento de reta aberto*, ou *intervalo aberto*, de dois pontos x e y é dada por

$$(x, y) = \{z \in \mathbb{R}^n \mid z = x + \alpha(y - x) ; 0 < \alpha < 1\}.$$

Se observarmos a ordem dos pontos x e y na definição do segmento de reta

fechado $[x, y]$, eles definem um *segmento orientado* \overrightarrow{xy} de *origem*, ou *início*, no ponto x e *extremidade*, ou *término*, no ponto y . Apesar de os segmentos de reta fechados $[x, y]$ e $[y, x]$ serem iguais, os segmentos orientados \overrightarrow{xy} e \overrightarrow{yx} são distintos. Dois segmentos orientados \overrightarrow{uv} e \overrightarrow{xy} são chamados de *equipolentes* quando $y - x = v - u$.

A Figura 1.1 mostra a diferença entre os segmentos orientados \overrightarrow{xy} e \overrightarrow{yx} .

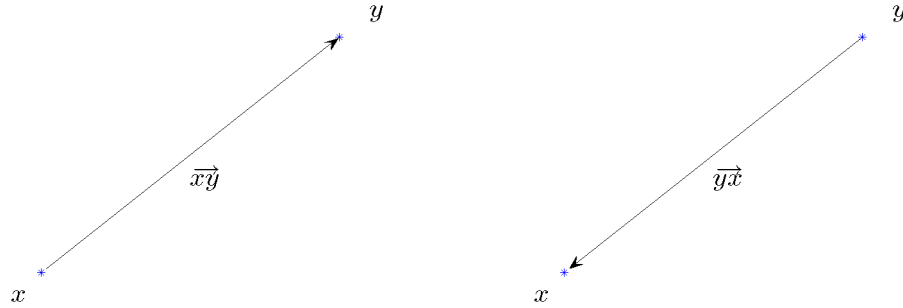


Figura 1.1: Segmentos orientados.

1.3.1 Vetor

Um *vetor* em \mathbb{R}^n é um conjunto de segmentos orientados equipolentes. Ele é representado geometricamente por um de seus segmentos orientados, e algebricamente por uma matriz coluna de n entradas. Se um segmento orientado \overrightarrow{xy} é um elemento de um vetor, então ele é um representante geométrico do vetor, e algebricamente o vetor corresponde à matriz coluna $y - x$. O *vetor posição* de um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é o vetor que tem como um de seus representantes um segmento orientado com origem no ponto O e extremidade no ponto x , e portanto possui as mesmas coordenadas do ponto x . Um vetor *pertence* ao espaço \mathbb{R}^n se ele é o vetor posição de algum ponto do espaço.

O vetor nulo de um espaço \mathbb{R}^n será representado neste trabalho por $\bar{0}$ independentemente de n . O vetor posição de um ponto do espaço \mathbb{R}^n será denotado pela mesma letra do ponto, pois eles possuem as mesmas coordenadas. Assim, o vetor posição de um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é o vetor x . Do mesmo modo, um vetor x define as coordenadas de um ponto $x \in \mathbb{R}^n$. A Figura 1.2 ilustra o fato.

Quando multiplicamos um número real α por um vetor $z \in \mathbb{R}^n$, obtemos um múltiplo do vetor, e dizemos que o número α é um *escalar*.

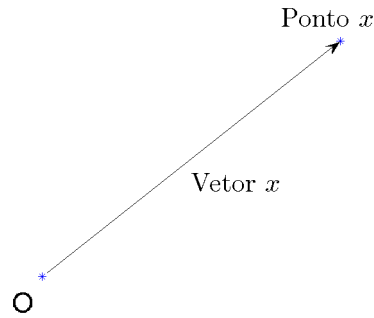


Figura 1.2: Um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ e seu vetor posição.

Dois vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$ são *paralelos* quando um dos vetores é nulo ou existe um escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $y = \alpha x$.

Um vetor $z \in \mathbb{R}^n$ é uma *combinação convexa* dos vetores x e y se $z \in (x, y)$. Nesse caso, $z - x = \alpha(y - x)$ para algum escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ com $0 < \alpha < 1$. Significa que os vetores $z - x$ e $y - x$ são paralelos, conforme ilustra a Figura 1.3.

A *translação* de um conjunto $U \subset \mathbb{R}^n$ por um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ é o conjunto

$$T = \{z \in \mathbb{R}^n \mid z = x + y, y \in U\}.$$

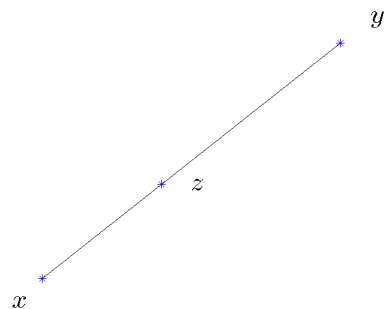


Figura 1.3: Combinação convexa.

1.4 Produto interno, norma, projeção ortogonal e distância

O *produto escalar canônico*, chamado simplesmente de *produto escalar*, de dois vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$ é definido como $x^T y$. Dois vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$ são *ortogonais* se $x^T y = 0$, e denotamos por $x \perp y$. A *norma euclidiana* de um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ é dada por $\|x\| = \sqrt{x^T x}$. A norma de um ponto é a norma de seu vetor posição. Neste trabalho, a norma utilizada é a euclidiana exceto quando há uma menção explícita a outra norma.

A *desigualdade de Cauchy-Schwarz* afirma que, para quaisquer vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$, $|x^T y| \leq \|x\| \|y\|$ e a igualdade ocorre se, e somente se, os dois vetores são paralelos.

O *teorema de Pitágoras*, em sua versão para o espaço \mathbb{R}^n , afirma que se $x, y \in \mathbb{R}^n$ são ortogonais, então $\|x + y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2$.

A *distância euclidiana* entre dois pontos $x, y \in \mathbb{R}^n$ é dada por $d(x, y) = \|x - y\|$. A distância euclidiana $d(x, U)$ entre um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ e um conjunto $U \subset \mathbb{R}^n$ é o ínfimo das distâncias euclidianas entre o ponto x e os pontos do conjunto. A distância euclidiana $d(U, T)$ entre dois conjuntos $U, T \subset \mathbb{R}^n$ é o ínfimo das distâncias euclidianas entre um ponto de U e um ponto de T . Quando os conjuntos são fechados, o ínfimo é o mínimo das distâncias.

1.5 Vizinhanças e bolas

Dado um ponto $x \in \mathbb{R}^n$, se o conjunto $U \subset \mathbb{R}^n$ é tal que existe um conjunto aberto $T \subset U$ para o qual $x \in T$, então U é uma *vizinhança* do ponto x .

Fixado um ponto $y \in \mathbb{R}^n$ e um escalar $\Delta > 0$, a *bola fechada* \bar{B} de raio Δ e centro y é o conjunto

$$\bar{B} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - y\| \leq \Delta\}$$

e a *bola aberta* \tilde{B} de raio Δ e centro y é o conjunto

$$\tilde{B} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - y\| < \Delta\}.$$

Optamos por usar neste trabalho bolas abertas e fechadas como vizinhanças para um ponto $x \in \mathbb{R}^n$.

A próxima proposição estabelece uma relação entre normas e produto interno relativos a dois pontos de uma bola centrada na origem, conforme ilustrado na Figura 1.4.

Proposição 1.1 *Seja o conjunto $\bar{B} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq \Delta\}$ para um certo $\Delta > 0$. Dados dois pontos distintos $y, y^* \in \bar{B}$, temos que $y^T y^* < \Delta^2$.*

Prova. De acordo com a desigualdade de Cauchy-Schwarz, se $y \in \bar{B}$ não é um múltiplo de y^* , então

$$|y^T y^*| < \|y\| \|y^*\|.$$

Logo,

$$y^T y^* < \Delta^2.$$

Caso y é um múltiplo de y^* e diferente de y^* , sem perda de generalidade podemos considerar que $\|y\| \leq \|y^*\|$. Daí, $y = \alpha y^*$ para algum escalar $\alpha \in \mathbb{R}^n$ com $\alpha < 1$. Assim,

$$y^T y^* = \alpha (y^*)^T y^* < \Delta^2.$$

□

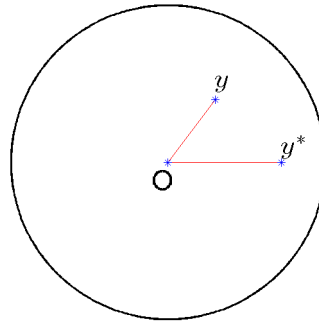


Figura 1.4: Proposição 1.1.

1.6 Subespaços vetoriais

Um conjunto não vazio $V \subset \mathbb{R}^n$ é um *subespaço vetorial* do espaço \mathbb{R}^n quando, dados dois pontos quaisquer $x, y \in V$,

$$x + y \in V \quad \text{e} \quad \alpha x \in V$$

para qualquer escalar $\alpha \in \mathbb{R}$.

Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, o *núcleo* da matriz A ,

$$\mathcal{N}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = \bar{0}\}$$

é um subespaço vetorial do espaço \mathbb{R}^n , e a *imagem* da matriz A ,

$$Im(A) = \{y \in \mathbb{R}^m \mid y = Ax ; x \in \mathbb{R}^n\}$$

é um subespaço vetorial do espaço \mathbb{R}^m . A *nulidade* da matriz A é a dimensão de seu núcleo, e o *posto* da matriz é a dimensão da sua imagem. As matrizes A e A^T possuem o mesmo posto. A soma do posto e da nulidade da matriz A é igual a n .

Um vetor x é *paralelo* a um subespaço vetorial V se o ponto x pertence ao subespaço. Um vetor x é *ortogonal* ao subespaço vetorial V se ele é ortogonal a qualquer vetor paralelo a V , isto é, $x^T y = 0, \forall y \in V$. O vetor $\bar{0} \in \mathbb{R}^n$ é o único vetor ortogonal a todos os vetores do espaço \mathbb{R}^n , logo $\{\bar{0}\}^\perp = \mathbb{R}^n$.

1.6.1 Subespaços ortogonais

Dado um subespaço vetorial $V \subset \mathbb{R}^n$, o *complemento ortogonal* do subespaço V é o conjunto

$$V^\perp = \{y \in \mathbb{R}^n \mid y^T x = 0, \forall x \in V\}.$$

O conjunto V^\perp é um subespaço vetorial, $(V^\perp)^\perp = V$ e $V \cap V^\perp = \{\bar{0}\}$. Dado um vetor $z \in \mathbb{R}^n$ e um subespaço vetorial $V \subset \mathbb{R}^n$, o vetor pode ser decomposto de forma única em um vetor paralelo a V e um paralelo a V^\perp , ou seja, existem únicos $x \in V$ e $y \in V^\perp$ tais que $z = x + y$. Denotamos o fato por

$$\mathbb{R}^n = V \oplus V^\perp.$$

O ponto x assim obtido é a *projeção ortogonal* do ponto z no subespaço vetorial V . Conseqüentemente, o ponto y é a projeção ortogonal do ponto z no subespaço vetorial V^\perp . A Figura 1.5 ilustra a decomposição.

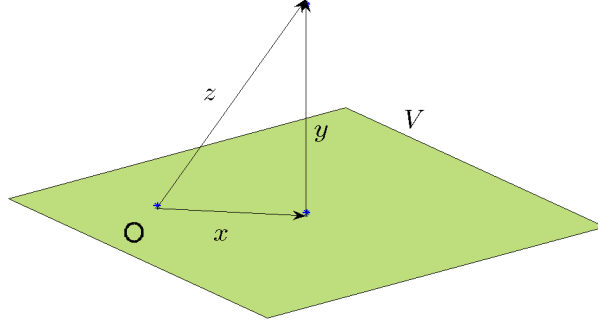


Figura 1.5: Decomposição e projeção ortogonal.

A proposição seguinte estabelece uma relação de ortogonalidade entre subespaços definidos por uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Proposição 1.2 *Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, os subespaços vetoriais $\text{Im}(A^T)$ e $\mathcal{N}(A)$, contidos no espaço \mathbb{R}^n , são ortogonalmente complementares.*

Prova. Seja $v \in \mathbb{R}^n$. Temos que

$$v \in \text{Im}(A^T)^\perp \iff v^T w = 0, \forall w \in \text{Im}(A^T).$$

Todos os elementos do conjunto $\text{Im}(A^T)$ são da forma $w = A^T u$ para $u \in \mathbb{R}^m$. Logo,

$$v^T w = 0, \forall w \in \text{Im}(A^T) \iff v^T (A^T u) = 0, \forall u \in \mathbb{R}^m.$$

Como $v^T (A^T u) = u^T (Av)$, pois $v^T (A^T u) \in \mathbb{R}$,

$$v^T (A^T u) = 0, \forall u \in \mathbb{R}^m \iff u^T (Av) = 0, \forall u \in \mathbb{R}^m.$$

O único vetor ortogonal a todos os vetores de \mathbb{R}^m é o vetor nulo. Assim,

$$u^T (Av) = 0, \forall u \in \mathbb{R}^m \iff v \in \mathcal{N}(A).$$

Portanto, $\text{Im}(A^T)^\perp = \mathcal{N}(A)$. □

Pela proposição anterior, a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ define dois subespaços ortogonalmente complementares no espaço \mathbb{R}^n , $Im(A^T)$ e $\mathcal{N}(A)$, e sua transposta A^T define dois subespaços ortogonalmente complementares em \mathbb{R}^m , $\mathcal{N}(A^T)$ e $Im(A)$. Logo,

$$\mathbb{R}^n = Im(A^T) \oplus \mathcal{N}(A) \quad \text{e} \quad \mathbb{R}^m = \mathcal{N}(A^T) \oplus Im(A).$$

Um fato importante sobre subespaços definidos por uma matriz é que

$$\mathcal{N}(A^T A) = \mathcal{N}(A).$$

Com efeito, $\mathcal{N}(A) \subset \mathcal{N}(A^T A)$ e, dado $x \in \mathcal{N}(A^T A)$, temos que $Ax \in \mathcal{N}(A^T) \cap Im(A)$, ou seja, $Ax = \bar{0}$, e portanto $x \in \mathcal{N}(A)$. Como consequência, a nulidade das matrizes A e $A^T A$ é a mesma.

1.7 Singularidade, autovalores e autovetores

Uma matriz quadrada $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é *não singular* se $\mathcal{N}(A) = \{\bar{0}\}$. Caso contrário, ela é *singular*. Uma matriz A não singular possui uma única *matriz inversa* $A^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que $AA^{-1} = A^{-1}A = I$. Para matrizes singulares, não há qualquer matriz inversa.

Dada uma matriz quadrada $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, um vetor não nulo $v \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz

$$Av = \gamma v$$

para um certo escalar $\gamma \in \mathbb{R}$ é um *autovetor*, ou *vetor característico*, da matriz A . O escalar γ é o *autovalor*, ou *valor característico*, associado ao autovetor v . A função polinomial $p_A : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$p_A(\gamma) = \det(A - \gamma I)$$

é o *polinômio característico* da matriz quadrada A . Os autovalores de uma matriz quadrada A são as raízes reais de seu polinômio característico.

Uma matriz quadrada A é singular se, e somente se, possui o autovalor nulo. Nesse caso, o subespaço vetorial $\mathcal{N}(A)$ é o conjunto de autovetores associados ao autovalor zero.

1.8 Matrizes simétricas definidas

Uma matriz quadrada $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é *simétrica* se $B^T = B$. Quando uma matriz é simétrica, todas as raízes de seu polinômio característico são reais.

Se, para todo vetor $x \in \mathbb{R}^n$ não nulo, a matriz simétrica $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é tal que:

1. $x^T B x > 0$, ela é *definida positiva*;
2. $x^T B x \geq 0$, ela é *semidefinida positiva*;
3. $x^T B x < 0$, ela é *definida negativa*;
4. $x^T B x \leq 0$, ela é *semidefinida negativa*;

Caso $x^T B x$ é positivo para alguns vetores e negativo para outros, a matriz é *indefinida*.

Os autovalores de uma matriz definida positiva são todos positivos. Os de uma matriz semidefinida positiva são não negativos. Os autovalores de uma matriz definida negativa são todos negativos. Os de uma matriz semidefinida negativa são não positivos. Matrizes simétricas indefinidas possuem alguns autovalores positivos e outros negativos, podendo possuir ou não o autovalor nulo.

Quando a matriz $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida positiva, o *produto interno por B* de dois vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$ é dado por $x^T B y$. Dois vetores x e y são *B-ortogonais*, ou *conjugados por B*, se $x^T B y = 0$. A *norma B* de um vetor x é $\|x\|_B = \sqrt{x^T B x}$. Vale ressaltar que o produto interno canônico é o produto interno por I , e a norma euclidiana de um vetor é a norma I desse vetor.

Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, as matrizes AA^T e $A^T A$ são semidefinidas positivas. As próximas duas proposições estabelecem algumas propriedades relativas a ambas as matrizes.

Proposição 1.3 Dada uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, se o vetor $b \in \mathbb{R}^m$ é um autovetor da matriz AA^T associado a um autovalor real $\gamma > 0$, então o vetor $c = A^T b \in \mathbb{R}^n$ é não nulo e é um autovetor da matriz $A^T A$ associado ao autovalor γ .

Prova. Por hipótese, $AA^T b = \gamma b$. Multiplicando ambos os membros à esquerda por A^T , temos que $A^T A c = \gamma c$. Desde que $b \notin \mathcal{N}(AA^T) = \mathcal{N}(A^T)$, o vetor c não é nulo. \square

Proposição 1.4 *Dados uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ um escalar $\mu > 0$, as matrizes $A^T A + \mu I$ e $AA^T + \mu I$ são definidas positivas.*

Prova. Para todo vetor $x \in \mathbb{R}^n$ não nulo,

$$x^T(A^T A + \mu I)x = \|Ax\|^2 + \mu\|x\|^2 > 0.$$

Analogamente, para todo vetor $y \in \mathbb{R}^m$ não nulo,

$$y^T(AA^T + \mu I)y = \|A^T y\|^2 + \mu\|y\|^2 > 0.$$

□

1.9 Funções em \mathbb{R}^n

Uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma *função real de n variáveis reais*. O valor da função f no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é $f(x)$. O *gradiente* da função f no ponto x , quando existe, é

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \quad \frac{\partial f}{\partial x_2}(x) \quad \dots \quad \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right]^T.$$

A *hessiana* da função f no ponto x , quando existe, é a matriz $\nabla^2 f(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ onde a entrada (i, j) da matriz é

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x).$$

Uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ pode ser escrita como

$$f = [f_1 \quad f_2 \quad \dots \quad f_m]^T$$

onde $f_1, f_2, \dots, f_m : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. A *jacobiana* da função f no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é a matriz

$$A_f(x) = \begin{bmatrix} (\nabla f_1(x))^T \\ (\nabla f_2(x))^T \\ \vdots \\ (\nabla f_m(x))^T \end{bmatrix}.$$

1.10 Variedades lineares

Nesta seção apresentamos o conceito e as propriedades de variedades lineares e de hiperplanos. Os lemas enunciados aqui baseiam-se nos comentários presentes em Luenberger [12, Apêndice B].

O espaço tridimensional contém pontos, retas e planos. Dados dois pontos de uma reta contida no espaço, eles definem a reta. Dados dois pontos em um plano contido no espaço, eles definem uma reta contida no plano. Motivados por essas propriedades, podemos definir no espaço \mathbb{R}^n subconjuntos munidos da mesma propriedade dos pontos, retas e planos no espaço tridimensional. São as variedades lineares.

Definição 1.5 *Um conjunto não vazio $L \subset \mathbb{R}^n$ é chamado de variedade linear¹ se, dados dois pontos $x, y \in L$ arbitrários, o conjunto*

$$r = \{z \in \mathbb{R}^n \mid z = \alpha x + (1 - \alpha)y, \alpha \in \mathbb{R}\}$$

definido por esses pontos está contido em L .

Na definição acima, se os pontos x e y forem distintos, o conjunto r é uma reta definida pelos dois pontos e contida no conjunto L .

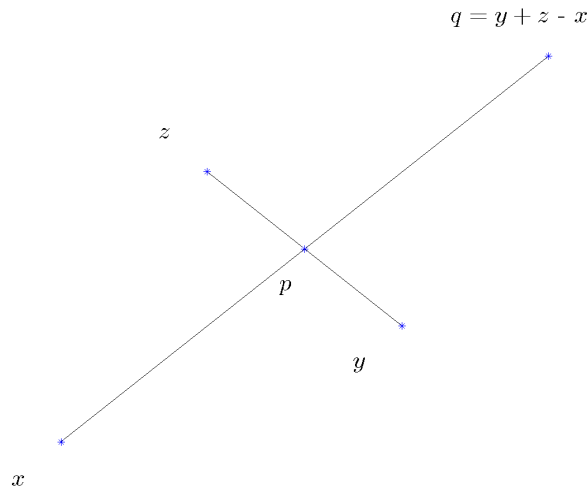


Figura 1.6: Pontos pertencentes a uma variedade linear L .

¹Em vários textos é usado o termo *variedade afim*.

Numa variedade linear L , dados três pontos $x, y, z \in L$, o ponto $y + z - x$ pertence à variedade linear. Com efeito, os pontos $p = \frac{1}{2}y + (1 - \frac{1}{2})z$ e $q = 2p + (1 - 2)x$ pertencem a L . Assim, $y + z - x = q \in L$. A Figura 1.6 apresenta o fato.

Veremos nas próximas proposições como caracterizar uma variedade linear.

Proposição 1.6 *Toda variedade linear do espaço \mathbb{R}^n resulta da translação de um subespaço vetorial de \mathbb{R}^n .*

Prova. Seja L uma variedade linear. Fixado um ponto $x \in L$, obtemos o conjunto

$$V = \{v \in \mathbb{R}^n \mid v = w - x, w \in L\}.$$

Dados dois pontos $a, b \in V$ arbitrários, existem dois pontos $y, z \in L$ tais que $a = y - x$ e $b = z - x$. Com isso,

$$a + b = (y + z - x) - x \quad \text{e} \quad \alpha a = (\alpha y + (1 - \alpha)x) - x$$

para um escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ qualquer. Como os pontos

$$y + z - x \quad \text{e} \quad \alpha y + (1 - \alpha)x$$

pertencem à variedade linear,

$$a + b \in V \quad \text{e} \quad \alpha a \in V.$$

Logo, o conjunto V é um subespaço vetorial do espaço \mathbb{R}^n , e a variedade linear L resulta da translação do subespaço vetorial V pelo vetor x . \square

Proposição 1.7 *Dados uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um ponto $b \in \mathbb{R}^m$, se o conjunto*

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

é não vazio, então ele é uma variedade linear.

Prova. Dados dois pontos $x, y \in L$ e um escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ arbitrários, temos que

$$A(\alpha x + (1 - \alpha)y) = \alpha b + (1 - \alpha)b = b.$$

Como isso ocorre para quaisquer $x, y \in L$ e $\alpha \in \mathbb{R}$, o conjunto L é uma variedade linear. \square

Proposição 1.8 *Se o conjunto L é uma variedade linear do espaço \mathbb{R}^n , então existem uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um vetor $b \in \mathbb{R}^m$ tais que*

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}.$$

Prova. Pela Proposição 1.6, a variedade linear L é obtida a partir da translação de um subespaço vetorial V por um vetor $v \in \mathbb{R}^n$. Considerando $a^1, \dots, a^m \in \mathbb{R}^n$ vetores que geram o subespaço vetorial V^\perp , obtemos a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ dada por

$$A = \begin{bmatrix} (a^1)^T \\ \vdots \\ (a^m)^T \end{bmatrix}$$

Desse modo, $V = \mathcal{N}(A)$.

Os pontos $x \in L$ são da forma $x = y + v$ com $y \in V$. Assim, $Ax = Av$. Tomando $b = Av$, chegamos a

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}.$$

\square

Pelas Proposições 1.7 e 1.8, um conjunto não vazio $L \subset \mathbb{R}^n$ é uma variedade linear se, e somente se, $L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$ para alguma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um certo vetor $b \in \mathbb{R}^m$. Pelas Proposições 1.6 e 1.8, a variedade linear L resulta de uma translação do núcleo da matriz A , conforme mostra a Figura 1.7. Desse modo, fixado um vetor $v \in L$, a variedade linear pode ser escrita como

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = v + y, y \in \mathcal{N}(A)\}.$$

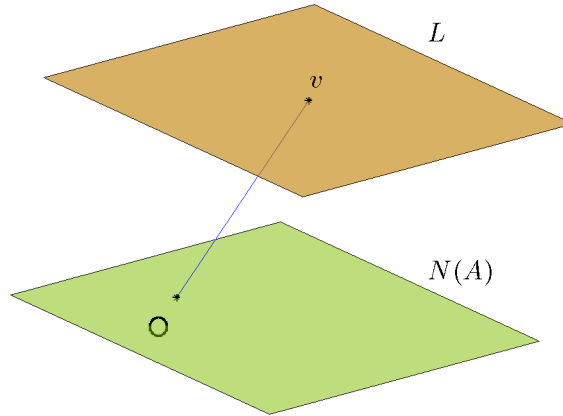


Figura 1.7: Variedade linear L resultante do deslocamento de $\mathcal{N}(A)$.

Seja a variedade linear L dada por

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

para uma certa matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um certo vetor $b \in \mathbb{R}^m$. Dados dois pontos $x, y \in L$, o vetor $x - y$ é tal que $(x - y) \in \mathcal{N}(A)$. De fato, como $Ax = b$ e $Ay = b$, temos que $A(x - y) = \bar{0}$. Pela Proposição 1.2, $z^T(x - y) = 0$ para qualquer vetor $z \in \mathbb{R}^n$ tal que $z \in \text{Im}(A^T)$.

Os *vetores paralelos* à variedade linear L são paralelos ao subespaço vetorial $\mathcal{N}(A)$ e vice-versa. Os *vetores ortogonais* à variedade linear L são paralelos ao subespaço $\text{Im}(A^T)$. Como a variedade linear é uma translação de um subespaço vetorial, ela é um conjunto fechado.

Assim como há um único ponto pertencente aos conjuntos $\mathcal{N}(A)$ e $\text{Im}(A^T)$, que é o vetor nulo, há também um único ponto comum aos conjuntos L e $\text{Im}(A^T)$, conforme a próxima proposição.

Proposição 1.9 *Dados uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um ponto $b \in \mathbb{R}^m$, se o conjunto*

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

é não vazio, então há um único ponto que pertence aos conjuntos L e $\text{Im}(A^T)$.

Prova. Primeiramente, precisamos garantir que $L \cap \text{Im}(A^T) \neq \emptyset$. Dado um ponto

$x \in L \subset \mathbb{R}^n$, há dois vetores $\bar{x} \in \text{Im}(A^T)$ e $\tilde{x} \in \mathcal{N}(A)$ tais que

$$x = \bar{x} + \tilde{x}.$$

Uma vez que $\tilde{x} \in \mathcal{N}(A)$,

$$A\bar{x} = A(x - \tilde{x}) = b$$

Portanto, $\bar{x} \in L \cap \text{Im}(A^T)$.

Para provar a unicidade, consideramos dois pontos $y, \hat{y} \in L \cap \text{Im}(A^T)$. Como eles pertencem a $\text{Im}(A^T)$, há dois vetores $z, \hat{z} \in \mathbb{R}^m$ tais que

$$y = A^T z \quad \text{e} \quad \hat{y} = A^T \hat{z}.$$

Como eles também pertencem a L ,

$$AA^T z = b \quad \text{e} \quad AA^T \hat{z} = b.$$

Dessa forma,

$$z - \hat{z} \in \mathcal{N}(AA^T) = \mathcal{N}(A^T).$$

Logo,

$$y - \hat{y} = A^T(z - \hat{z}) = \bar{0}.$$

Portanto, os pontos y e \hat{y} coincidem. □

De acordo com a Proposição 1.9, quando o conjunto L é não vazio, para qualquer vetor $z \in \mathbb{R}^m$ que satisfaz a relação

$$AA^T z = b, \tag{1.1}$$

o ponto

$$y = A^T z \tag{1.2}$$

é o único que pertence a $L \cap \text{Im}(A^T)$. Portanto, é o único ponto da variedade linear L cujo vetor posição é ortogonal à variedade.

Devido à relação entre variedades lineares e subespaços vetoriais, podemos definir a dimensão de uma variedade linear.

Definição 1.10 *Seja L uma variedade linear resultante da translação de um subespaço vetorial V . A dimensão da variedade linear é definida como $\dim(L) = \dim(V)$.*

Pela definição, a dimensão da variedade linear $L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$ é igual à nulidade da matriz A .

No Capítulo 4 serão discutidos alguns problemas de programação não linear relacionados a variedades lineares.

1.10.1 Hiperplanos

No espaço \mathbb{R}^n , as variedades lineares de dimensão $n - 1$ são chamadas de *hiperplanos*. Tais conjuntos são da forma

$$H = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p^T x = \sigma\} \quad (1.3)$$

para um certo vetor não nulo $p \in \mathbb{R}^n$ e um certo escalar $\sigma \in \mathbb{R}$.

Todos os vetores paralelos ao hiperplano H são ortogonais ao vetor p . Os vetores não nulos paralelos ao vetor p são ditos *normais* ao hiperplano H . O ponto

$$p^* = \frac{\sigma}{\|p\|^2} p \quad (1.4)$$

pertence ao hiperplano H .

Podemos associar ao hiperplano H definido em (1.3) os seguintes conjuntos:

1. o semi-espaço aberto positivo $H_+ = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p^T x > \sigma\}$;
2. o semi-espaço aberto negativo $H_- = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p^T x < \sigma\}$;
3. o semi-espaço fechado positivo $\bar{H}_+ = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p^T x \geq \sigma\}$;
4. o semi-espaço fechado negativo $\bar{H}_- = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p^T x \leq \sigma\}$.

A Figura 1.8 exhibe os semi-espaços abertos definidos por um hiperplano H .

As proposições a seguir exibem algumas propriedades sobre pontos relativos a hiperplanos.

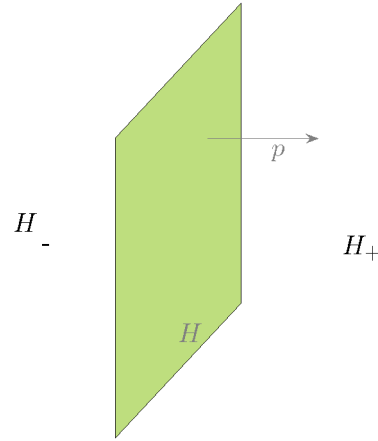


Figura 1.8: Hiperplano H e semi-espacos abertos.

Proposição 1.11 *O ponto p^* , definido em (1.4), é o ponto do hiperplano H , dado em (1.3), de menor norma euclidiana.*

Prova. Seja h um ponto do hiperplano H distinto de p^* . O vetor

$$v = h - p^*$$

é não nulo. Como $h = v + p^*$ e $v^T p^* = 0$,

$$\|h\|^2 = \|v\|^2 + \|p^*\|^2.$$

Uma vez que $v \neq \bar{0}$,

$$\|h\|^2 > \|p^*\|^2.$$

Portanto, para qualquer ponto $h \in H$ diferente de p ,

$$\|h\| > \|p^*\|.$$

□

A demonstração da Proposição 1.11 pode ser melhor entendida a partir da Figura 1.9.

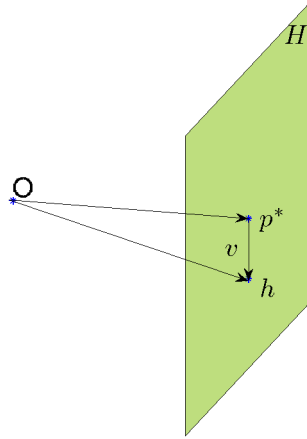


Figura 1.9: Proposição 1.11.

Proposição 1.12 *Seja o hiperplano H definido em (1.3). Se os pontos $x, y \in \mathbb{R}^n$ se encontram em semi-espacos abertos distintos relativos a H , então:*

- 1) $p^T(x - y) \neq 0$;
- 2) *há um ponto $h \in (x, y)$ tal que $h \in H$.*

Prova. Por x e y estarem em semi-espacos abertos diferentes, sem perda de generalidade podemos considerar que

$$p^T x > \sigma \quad \text{e} \quad p^T y < \sigma. \quad (1.5)$$

Daí, $p^T(x - y) > \sigma - \sigma$. Ou seja,

$$p^T(x - y) \neq 0,$$

o que prova (1).

Se o ponto $h \in \mathbb{R}^n$ é um ponto do intervalo aberto (x, y) , então

$$h = y + \alpha(x - y)$$

para algum escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ com $0 < \alpha < 1$. Tomando

$$\bar{\alpha} = \frac{\sigma - p^T y}{p^T x - p^T y},$$

como, por (1.5), $p^T x - p^T y > \sigma - p^T y > 0$,

$$0 < \bar{\alpha} < 1.$$

O ponto

$$h = y + \bar{\alpha}(x - y) \in (x, y)$$

é tal que $p^T h = 0$, ou seja, $h \in H$, o que confirma (2). \square

De acordo com a Proposição 1.12, se dois pontos $x, y \in \mathbb{R}^n$ se encontram em subespaços abertos distintos relativos a H , então o vetor $x - y$ não é paralelo ao hiperplano H e há um ponto do conjunto H cujo vetor posição é uma combinação convexa dos vetores x e y , conforme mostra a Figura 1.10.

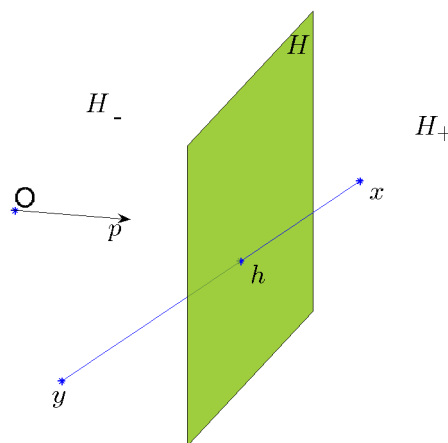


Figura 1.10: Proposição 1.12.

1.10.2 Variedades lineares associadas a uma matriz e a um vetor

Dados uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e um vetor $b \in \mathbb{R}^m$, há associado a eles o vetor

$$c = A^T b \in \mathbb{R}^n \tag{1.6}$$

e três conjuntos:

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}; \quad (1.7)$$

$$G = \{x \in \mathbb{R}^n \mid A^T Ax = c\}; \quad (1.8)$$

$$P = \{x \in \mathbb{R}^n \mid c^T x = \|b\|^2\}. \quad (1.9)$$

Podemos decompor o vetor b como $b = \bar{b} + \tilde{b}$ onde

$$\bar{b} \in \mathcal{N}(A^T) \quad \text{e} \quad \tilde{b} \in \text{Im}(A). \quad (1.10)$$

O conjunto L é não vazio somente se $\bar{b} = \bar{0}$. Nesse caso, L é uma variedade linear conforme a Proposição 1.7.

Quando $\tilde{b} = \bar{0}$, o vetor c é nulo, pois $b \in \mathcal{N}(A^T)$. Em tal situação, se $b \neq \bar{0}$ então $L = \emptyset$ e $P = \emptyset$, e se $b = \bar{0}$ então $L = \mathcal{N}(A)$ e $P = \mathbb{R}^n$.

Quando $c = \bar{0}$ e $L \neq \emptyset$, o vetor b é nulo. De fato, dado um certo ponto $x \in L$, temos que $b^T Ax = b^T b$. Segundo (1.6), $c^T x = \|b\|^2$. Portanto, $b = \bar{0}$.

Caso $c \neq \bar{0}$, o conjunto P é um hiperplano. De acordo com (1.3), (1.4) e a Proposição 1.11, o ponto

$$c^* = \frac{b^T b}{c^T c} c \quad (1.11)$$

é o ponto do hiperplano P de menor norma euclidiana.

Os três lemas a seguir mostram que a variedade linear G sempre existe e que, quando $L \neq \emptyset$, $L = G$ e $L \subset P$.

Proposição 1.13 *O conjunto G , definido em (1.8), é não vazio.*

Prova. O vetor $b \in \mathbb{R}^m$ pode ser decomposto em dois vetores segundo (1.10). Como existe um vetor $v \in \mathbb{R}^n$ tal que $\tilde{b} = Av$, por (1.6),

$$c = A^T b = A^T (\bar{b} + \tilde{b}) = A^T Av.$$

Portanto $v \in G$. □

Proposição 1.14 *Sejam os conjuntos L e G dados em (1.7) e (1.8). Se $L \neq \emptyset$, então $L = G$.*

Prova. Devemos mostrar que $L \subset G$ e $G \subset L$.

Seja um ponto $x \in L$. Então ele satisfaz

$$Ax = b.$$

Multiplicando à esquerda pela matriz A^T e usando (1.6),

$$A^T Ax = c.$$

Logo, $x \in G$.

Seja agora um ponto $y \in G$. Então ele satisfaz

$$A^T Ay = c = A^T b.$$

Daí,

$$A^T (Ay - b) = \bar{0}.$$

Segue que

$$Ay - b \in \mathcal{N}(A^T).$$

Uma vez que $L \neq \emptyset$, há um vetor $v \in \mathbb{R}^n$ de modo a $Av = b$. Assim,

$$Ay - b = A(y - v) \in \text{Im}(A).$$

Com isso,

$$Ay - b = \bar{0}.$$

Logo, $y \in L$. □

Proposição 1.15 *Sejam o vetor c e os conjuntos L e P definidos respectivamente em (1.6), (1.7) e (1.9). Se $c \neq \bar{0}$, então P é um hiperplano que contém o conjunto L .*

Prova. Caso $L = \emptyset$, então $L \subset P$. Quando $L \neq \emptyset$, tomamos um ponto $x \in L$. Logo, $Ax = b$. Assim, $b^T Ax = b^T b$, ou seja, $c^T x = \|b\|^2$. Portanto, $x \in P$. □

Quando o conjunto L não é vazio e $b \neq \bar{0}$, o vetor c não é nulo, segundo a próxima proposição. Como consequência, $Im(A^T) \neq \{\bar{0}\}$ de acordo com o Corolário 1.17.

Proposição 1.16 *Seja o conjunto L dado em (1.7). Se $L \neq \emptyset$ e $b \neq \bar{0}$, então o vetor c , definido em (1.6), não é nulo.*

Prova. Existe um elemento $v \in L$, de modo que $Av = b$. Assim, $b \in Im(A)$. Como $b \neq \bar{0}$, pela Proposição 1.2, $b \notin \mathcal{N}(A^T)$. Logo, $c = A^T b \neq \bar{0}$. \square

Corolário 1.17 *Seja o conjunto L dado em (1.7). Se $L \neq \emptyset$ e $b \neq \bar{0}$, então há um vetor $c \in \mathbb{R}^n$ não nulo tal que $c \in Im(A^T)$.*

Prova. Pela Proposição 1.16, o vetor $c = A^T b$ é não nulo. Por construção, $c \in Im(A^T)$. \square

A Figura 1.11 apresenta os conjuntos L , G e P numa situação em que $b \neq \bar{0}$ e $L \neq \emptyset$. Também é mostrado o ponto c^* , ponto de menor norma euclidiana do hiperplano P .

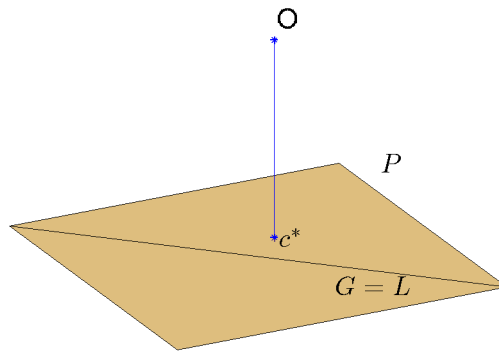


Figura 1.11: Proposição 1.12.

Capítulo 2

Programação não linear

A programação não linear é a área da Matemática voltada ao estudo de problemas de otimização de funções de várias variáveis que possuem restrições no seu domínio. Ela visa estabelecer as propriedades dos problemas, caracterizar as soluções e definir algoritmos para encontrar uma ou mais soluções.

Neste capítulo discutimos o que é um problema de programação não linear e sua solução. Apresentamos uma visão geral sobre algoritmos matemáticos e abordamos alguns algoritmos para a minimização de funções continuamente diferenciáveis, com ou sem restrições. As principais referências para o capítulo são [9, 12, 15, 16].

2.1 O problema de programação não linear

A área de programação não linear tem por objetivo estudar o seguinte problema:

$$\begin{array}{ll} \text{(P)} & \text{minimizar } f_0(x) \\ & \text{sujeito a } x \in S \subset \mathbb{R}^n \end{array}$$

A função $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada *função objetivo*. O conjunto fechado S , definido comumente por um sistema de igualdades e desigualdades, é o *conjunto viável*. Os pontos do espaço \mathbb{R}^n pertencentes ao conjunto viável são os *pontos viáveis*, e os não pertencentes são os *pontos inviáveis*.

A maximização de uma função real f_0 em uma certa região do espaço \mathbb{R}^n corresponde à minimização da função $-f_0$ na mesma região.

As soluções $x^* \in S$ do problema são os *minimizadores* do problema, e os respectivos valores $f_0(x^*)$ são os *mínimos*, ou *valores mínimos*, do problema. Dois problemas são *equivalentes* se possuem as mesmas soluções.

Quando o conjunto viável é $S = \mathbb{R}^n$, dizemos que o problema (P) é *irrestrito*. Se $S = \emptyset$, o problema é dito *inviável*. Caso S seja um subconjunto próprio de \mathbb{R}^n e não vazio, dizemos que o problema é *restrito*, ou *com restrição*.

O problema geral de programação não linear é da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \min f_0(x) \\ \text{(PEI)} \quad & \text{s. a } f_E(x) = \bar{0} \\ & f_I(x) \leq \bar{0} \end{aligned}$$

onde a função $f_E = (f_1, f_2, f_3, \dots, f_p)^T$ representa as funções das restrições de igualdade, a função $f_I = (f_{p+1}, f_{p+2}, f_{p+3}, \dots, f_m)^T$ representa as funções das restrições de desigualdade, e $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ para $i = 0, 1, 2, \dots, m$. Vale ressaltar que o conjunto viável é $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f_E(x) = \bar{0}, f_I(x) \leq \bar{0}\}$.

Quando a função objetivo e as restrições são lineares, isto é, f_i é uma transformação afim para $i = 0, 1, 2, \dots, m$, dizemos que o problema é um *problema de programação linear*.

2.2 Solução do problema

Antes de esclarecer o que é uma solução de um problema de programação não linear, é necessário apresentar as seguintes definições:

Definição 2.1 Um ponto $x^* \in S$ é dito *minimizador global* da função objetivo do problema (P) se $f_0(x^*) \leq f_0(x)$ para todo $x \in S$. Nesse caso, $f_0(x^*)$ é chamado de *mínimo de f_0 em S* .

Definição 2.2 Dizemos que um ponto $x^* \in S$ é *minimizador local* da função objetivo do problema (P) se existe $\varepsilon > 0$ de modo que $f_0(x^*) \leq f_0(x)$ para todo $x \in S$ tal que $\|x - x^*\| \leq \varepsilon$.

Definição 2.3 Um ponto $x^* \in S$ é chamado de *minimizador local estrito* da função objetivo do problema (P) se existe $\varepsilon > 0$ de modo que $f_0(x^*) < f_0(x)$ para todo $x \in S$ tal que $0 < \|x - x^*\| \leq \varepsilon$.

De forma geral, encontrar os minimizadores globais é difícil, pois o conhecimento do comportamento da função é normalmente local. A maioria dos algoritmos de programação não linear são capazes de encontrar os minimizadores locais de um problema. Por isso, é considerada uma *solução* de um problema de programação não linear um minimizador local.

Na próxima seção serão discutidas, para uma classe de problemas de programação não linear, algumas condições necessárias para um ponto viável ser uma solução.

2.3 Condições de qualificação e de otimalidade

Dependendo das propriedades da função objetivo e do conjunto viável, é possível estabelecer alguns critérios para avaliar se um ponto viável com certas propriedades é uma solução do problema. Tais critérios são as *condições de otimalidade* do problema, e as propriedades que o ponto deve possuir para ser avaliado pelas condições de otimalidade são as *condições de qualificação*.

Para o problema de programação não linear (PEI) com a função f_i continuamente diferenciável para $i = 0, 1, 2, \dots, m$, se um ponto viável atende a condição de qualificação da regularidade, que será definida a seguir, ele satisfaz algumas propriedades quando é uma solução do problema.

Assumiremos ao longo desta seção que as funções f_i do problema (PEI) são continuamente diferenciáveis.

Definição 2.4 *Seja o problema (PEI) onde f_i é continuamente diferenciável para $i = 0, 1, 2, \dots, m$. Um ponto viável x^* é dito um ponto regular se os vetores $\nabla f_i(x^*)$ para $i \in \mathcal{K} = \{k \in \mathbb{N} \mid f_k(x^*) = 0\}$ são linearmente independentes.*

O teorema a seguir, cuja demonstração será omitida, exhibe as condições de otimalidade necessárias para um ponto regular ser uma solução do problema (PEI). Observamos que A_E é a jacobiana da função f_E e A_I é a jacobiana da função f_I .

Teorema 2.5 (Condições de Karush-Kuhn-Tucker) *Seja o problema (PEI) onde f_i é continuamente diferenciável para $i = 0, 1, 2, \dots, m$. Se o ponto regular x^* é uma solução, então existem um vetor $\lambda \in \mathbb{R}^p$ e um vetor $\mu \in \mathbb{R}^{m-p}$ tais que:*

$$\nabla f_0(x^*) + A_E^T(x^*)\lambda + A_I^T(x^*)\mu = \bar{0};$$

$$\mu_j f_{p+j}(x^*) = 0, \quad j = 1, \dots, m - p;$$

$$\mu \geq \bar{0}.$$

Prova. Ver, por exemplo, [12, Seção 10.8]. \square

Definimos a *função lagrangeano*, ou simplesmente o *lagrangeano*, do problema (PEI) como a função $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^{m-p} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \mu) = f_0(x) + \lambda^T f_E(x) + \mu^T f_I(x) \quad (2.1)$$

Os vetores λ e μ são chamados de *multiplicadores de Lagrange*.

Segundo o Teorema 2.5, uma das condições de Karush-Kuhn-Tucker é

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda, \mu) = \bar{0}.$$

Quando há apenas restrições de igualdade, o problema (PEI) reduz-se ao problema

$$\begin{aligned} \text{(PE)} \quad & \min \quad f_0(x) \\ & \text{s. a} \quad f_E(x) = \bar{0} \end{aligned}$$

onde $f_E : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. A função lagrangeano $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ do problema (PE) é

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f_0(x) + \lambda^T f_E(x)$$

e as condições de Karush-Kuhn-Tucker para uma solução regular x^* correspondem a haver um vetor $\lambda \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda) = \bar{0}.$$

Caso haja apenas restrições de desigualdade, o problema (PEI) reduz-se ao problema

$$\begin{aligned} \text{(PI)} \quad & \min \quad f_0(x) \\ & \text{s. a} \quad f_I(x) \leq \bar{0} \end{aligned}$$

onde $f_I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. A função lagrangeano $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ do problema (PI) é

$$\mathcal{L}(x, \mu) = f_0(x) + \mu^T f_I(x)$$

e as condições de Karush-Kuhn-Tucker para uma solução regular x^* correspondem a haver um vetor $\mu \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \mu) = \bar{0}.$$

$$\mu_j f_j(x^*) = 0, \quad j = 1, \dots, m;$$

$$\mu \geq \bar{0}.$$

Vale ressaltar que um ponto viável x^* satisfazendo $f_j(x) < 0$ para $j = 1, \dots, m$ é um ponto regular, e portanto as condições de Karush-Kuhn-Tucker são válidas caso o ponto seja uma solução do problema (PI). Nessa situação, o Teorema 2.5 afirma que $\nabla f_0(x^*) = \bar{0}$, pois o multiplicador de Lagrange μ é nulo.

2.4 Algoritmos

Em geral, os algoritmos de programação não linear são algoritmos iterativos. Nesta seção, discutiremos o que é um algoritmo iterativo para problemas matemáticos, bem como algumas propriedades que permitem estabelecer critérios de convergência e de término para algoritmos de programação não linear. As referências para a seção são Bazaraa, Sherali e Shetty [1, Capítulo 7], Luenberger [12, Seção 6.6], Polak [17, Seção 1.3] e Zangwill [19, Capítulo 4].

2.4.1 Algoritmos iterativos

Para problemas matemáticos, podemos construir um procedimento de solução iterativo a partir de uma aplicação. Relativamente aos problemas de otimização, é possível formalizar os conceitos de algoritmo e algoritmo iterativo como segue.

Definição 2.6 Um algoritmo \mathcal{A} , ou procedimento de solução \mathcal{A} , é uma aplicação $\mathcal{A} : X \rightarrow \mathcal{P}(X)$ tal que $\mathcal{A}(x) \neq \emptyset$ para todo $x \in X$.

Na definição, o espaço X pode ser o espaço \mathbb{R}^n , um subconjunto não vazio de \mathbb{R}^n ou um espaço métrico mais geral.

Definição 2.7 Um algoritmo iterativo, ou processo iterativo, é um algoritmo que gera uma sequência de pontos $(x^k) \subset X$, cada um deles calculado a partir de seus predecessores, sendo o primeiro ponto da sequência, x^0 , a entrada.

Uma *iteração* k , ou *passo iterativo* k , do algoritmo iterativo é uma sequência de cálculos feitos sobre o ponto x^k ou anteriores que resultam no ponto x^{k+1} . O ponto x^k é dito *ponto corrente* da iteração.

A partir de um algoritmo \mathcal{A} , é possível construir um algoritmo iterativo \mathcal{B} do seguinte modo: dado um ponto $x^k \in X$, tomamos um ponto x^{k+1} no conjunto $\mathcal{A}(x^k)$ segundo algum critério. Assim, o algoritmo \mathcal{A} gera, a partir de um ponto x^0 , uma sequência de pontos tendo como passo iterativo $x^{k+1} \in \mathcal{A}(x^k)$.

2.4.2 Algoritmos de decréscimo

Nos problemas matemáticos, deseja-se a construção de um algoritmo que encontre, em um conjunto, um ou mais elementos que atendem a uma determinada propriedade. Tais elementos constituem as soluções a serem obtidas pelo algoritmo.

Para encontrar uma solução de um problema, em muitas situações é construído um algoritmo iterativo de forma a, a cada iteração, reduzir o valor de uma certa função real definida a partir do problema. Algoritmos construídos dessa forma são chamados de *algoritmos de decréscimo*.

Para a definição de um algoritmo de decréscimo, tomamos um certo conjunto não vazio $X^* \subset X$ como sendo um *conjunto solução* em X .

Definição 2.8 Seja $X^* \subset X$ um dado conjunto solução e \mathcal{A} um algoritmo em X . Uma função real contínua φ em X é dita uma função de decréscimo, ou função de mérito, para X^* e \mathcal{A} quando:

- 1) dados $x \notin X^*$ e $y \in \mathcal{A}(x)$, temos $\varphi(y) < \varphi(x)$;
- 2) dados $x \in X^*$ e $y \in \mathcal{A}(x)$, temos $\varphi(y) \leq \varphi(x)$.

Se a função real contínua φ é decrescente para o algoritmo \mathcal{A} , então o algoritmo é chamado de *algoritmo decrescente* de φ . Um ponto que pertence ao conjunto solução é dito *solução* ou *ponto desejável*.

Há várias formas de definir um conjunto solução, um algoritmo e uma função de mérito para um dado problema de programação não linear. Para o problema

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s. a} \quad & x \in S \subset \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

podemos adotar como conjunto solução o conjunto dos minimizadores, a função f_0 como sendo a função de decréscimo, e definimos um algoritmo iterativo \mathcal{A} no conjunto viável S de modo que a função f_0 decresça a cada iteração. Para problemas irrestritos em que a função objetivo é diferenciável, uma outra possibilidade é tomar como conjunto solução $X^* = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \nabla f_0(x) = \bar{0}\}$. Nesse caso, podemos tomar como função de mérito f_0 ou a norma do gradiente da função objetivo, $\|\nabla f_0\|$.

Nos algoritmos de programação não linear, a função de mérito é usada para definir os critérios de convergência ou de parada do algoritmo.

2.4.3 Critérios de parada

De forma geral, os algoritmos iterativos geram uma seqüência infinita de pontos não desejados, em que um ou mais pontos de acumulação da seqüência é um ponto desejado.

Por conta disso, na implementação computacional de um algoritmo iterativo são usadas uma ou mais regras como critérios de parada do algoritmo. Os critérios mais usados em algoritmos iterativos de programação não linear são listados abaixo. O número real $\varepsilon > 0$, geralmente chamado de *tolerância*, e o inteiro positivo N são definidos previamente. Lembramos que φ e X^* são a função de decréscimo e o conjunto solução considerados para o problema.

1. $\|x^{k+N} - x^k\| < \varepsilon$

O algoritmo pára se a distância euclidiana entre um ponto e outro obtido após N iterações é menor que uma certa tolerância.

2. $\frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} < \varepsilon$

Quando a distância euclidiana do próximo ponto em relação ao ponto corrente é menor que a tolerância dada, o algoritmo termina.

$$3. \varphi(x^k) - \varphi(x^{k+N}) < \varepsilon$$

O algoritmo encerra quando, após N iterações, o decréscimo é menor que uma certa tolerância.

$$4. \frac{\varphi(x^k) - \varphi(x^{k+1})}{|\varphi(x^k)|} < \varepsilon$$

Se o decréscimo do próximo ponto em relação ao ponto corrente é menor que a tolerância dada, o algoritmo pára.

$$5. \varphi(x^k) - \varphi(\bar{x}) < \varepsilon, \text{ onde } \bar{x} \in X^*$$

Este critério é aplicável quando o valor $\varphi(\bar{x})$ é conhecido previamente. Por exemplo, em problemas irrestritos, se a função de mérito é $\varphi(x) = \|\nabla f_0(x)\|$ e o conjunto solução é $X^* = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|\nabla f_0(x)\| = 0\}$, então $\varphi(\bar{x}) = 0$.

Observamos que os critérios 1, 3 e 5 são diferenças absolutas, enquanto que os critérios 2 e 4 são variações relativas, sendo portanto menos sensíveis a mudanças de escala.

2.5 Problemas irrestritos

Os problemas irrestritos são da forma

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s. a} \quad & x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

onde $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Neste trabalho, supomos que a função objetivo é ao menos continuamente diferenciável.

Existem várias técnicas para a resolução de problemas irrestritos. Os métodos clássicos são procedimentos de solução que buscam, a cada iteração, uma direção a partir do ponto corrente que permite diminuir o valor da função objetivo. Escolhida a direção do passo, é feita uma busca linear para determinar o comprimento do passo. Numa dada iteração, a direção de busca é fixa. Exemplos dessa classe de métodos

são Cauchy, Newton e Quase-Newton. Uma discussão desses e de outros métodos de buscas direcionais podem ser encontrados em [1, 6, 12, 15, 17, 19].

Outra classe de métodos para resolver problemas irrestritos são os de região de confiança. A direção e o comprimento do passo são definidos simultaneamente nesses métodos. Diferentemente dos métodos de busca linear, numa dada iteração, tanto a direção como o comprimento do passo podem variar. A cada iteração, um modelo quadrático da função objetivo é obtido em torno do ponto corrente, e a busca é realizada em uma região onde os valores do modelo quadrático e da função objetivo se assemelham. Na Seção 2.5.1 apresentamos uma visão geral dos métodos de região de confiança [16, Capítulo 4]. Outras discussões sobre região de confiança podem ser encontradas em [3, 5].

Na Seção 3.2 serão vistas algumas propriedades relativas a funções quadráticas irrestritas, o problema dos quadrados mínimos e o método do gradiente conjugado para encontrar a solução em casos particulares. Um problema quadrático particular associado a um problema relativo a uma variedade linear é apresentado na Seção 4.4.2.

2.5.1 Os métodos de região de confiança

Seja o problema de programação não linear irrestrito

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s. a} \quad & x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

onde $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função duplamente continuamente diferenciável.

Os métodos de região de confiança obtêm uma solução de um problema de programação não linear irrestrito iterativamente através de uma seqüência de subproblemas. A cada iteração, a função objetivo é modelada por uma função quadrática cujos valores são próximos dos da função objetivo em uma determinada vizinhança em torno do ponto corrente; após a modelagem, é obtido um ponto na vizinhança que minimiza o modelo da função objetivo.

A vizinhança do ponto corrente onde a função objetivo é modelada é chamada de *região de confiança*. A função quadrática que modela a função objetivo em torno do ponto corrente é dita *modelo quadrático*.

O raio da região de confiança influencia no desempenho do método. Se a região for pequena, o algoritmo pode perder a oportunidade de obter uma direção de

minimização que aproxime o ponto corrente de um minimizador da função objetivo. Se a região for grande, o minimizador do modelo quadrático pode estar distante do minimizador na região de confiança da função objetivo. Dessa forma, o algoritmo deverá ser capaz de alterar o raio da região de confiança conforme algum critério adotado.

Na iteração k , tomamos como modelo quadrático da função objetivo f_0 em torno do ponto corrente x^k os três primeiros termos série de Taylor de f_0 em x^k :

$$q^k(p) = f_0^k + (\nabla f_0^k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p$$

onde $p \in \mathbb{R}^n$ é o passo a ser dado, $f_0^k = f_0(x^k)$, $\nabla f_0^k = \nabla f_0(x^k)$ e $B_k = \nabla^2 f_0(x^k)$.

Dessa forma, a cada iteração o método deverá resolver o subproblema

$$\begin{aligned} \text{(RC)} \quad & \min \quad q^k(p) = f_0^k + (\nabla f_0^k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \\ & \text{s. a} \quad \|p\| \leq \Delta_k \end{aligned}$$

onde $\Delta_k > 0$ é o raio da região de confiança, e assim obter o passo p^k .

A Figura 2.1 apresenta uma possível iteração do método.

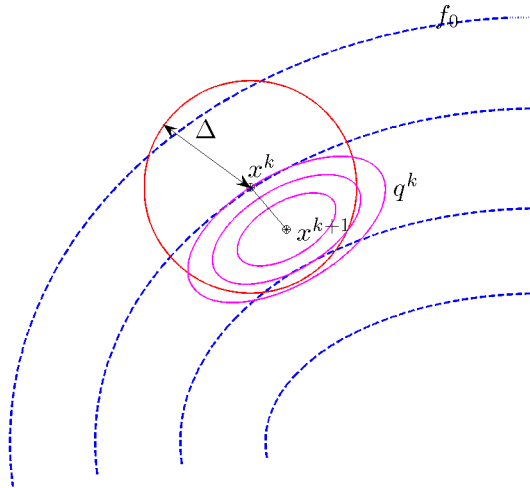


Figura 2.1: Uma iteração do método de região de confiança.

Como no caso geral o modelo quadrático na região de confiança não é idêntico à função objetivo nessa região, pode ocorrer de o passo p^k obtido para a minimização não ser adequado.

Como critério para obter o raio da região de confiança para a próxima iteração e avaliar o passo de minimização, calculamos a razão entre as reduções da função objetivo e do modelo quadrático obtidas na iteração corrente.

Dado um passo p^k , definimos a *redução verdadeira* como

$$ared_k = f_0(x^k) - f_0(x^k + p^k)$$

e a *redução predita* pelo modelo quadrático como

$$pred_k = q^k(0) - q^k(p^k).$$

Como o método minimiza o modelo quadrático a cada iteração, a redução predita é sempre não negativa.

Se a razão

$$\rho_k = \frac{ared_k}{pred_k}$$

é negativa ou próxima de zero, a região de confiança deve ser reduzida e o passo p^k deve ser rejeitado, e o algoritmo deve fazer uma nova busca a partir do ponto corrente x^k . Caso a razão seja próxima a ou maior que 1, então a região de confiança pode ser aumentada e o passo p^k é aceito. Se a razão é positiva mas não próxima de 1, então a região de confiança não é alterada e o passo p^k é aceito.

Algoritmo 2.9 Região de confiança

Dados $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\Delta_{\max} > 0$, $\Delta_0 \in (0, \Delta_{\max})$, $\eta \in [0; 0,25]$.

$k = 0$

Enquanto o critério de parada não for satisfeito:

Obter p^k resolvendo (de forma aproximada) o problema (RC).

$$ared_k = f_0(x^k) - f_0(x^k + p^k)$$

$$pred_k = q^k(0) - q^k(p^k)$$

Se $ared_k < 0,25 pred_k$

$$\Delta_{k+1} = 0,25\Delta_k$$

Senão

Se $ared_k > 0,75 pred_k$ e $\|p^k\| = \Delta_k$

$$\Delta_{k+1} = \min\{2\Delta_k, \Delta_{\max}\};$$

Senão

$$\Delta_{k+1} = \Delta_k;$$

Se $ared_k > \eta pred_k$

$$x^{k+1} = x^k + p^k$$

Senão

$$x^{k+1} = x^k;$$

$$k = k + 1$$

Fim do enquanto.

Para obter o passo p^k no algoritmo acima, o importante é o valor da função objetivo ser reduzido a cada iteração. Por isso, não é necessário encontrar a solução exata do problema (RC). Basta que seja encontrado um ponto na região de confiança que reduza o valor do modelo quadrático em relação ao seu valor no ponto $p = \bar{0}$.

Na Seção 3.3 são analisados dois métodos para obter uma solução aproximada para um problema quadrático em uma bola. São o método de *dogleg* e a aproximação de Steihaug.

2.6 Problemas com restrições

Os problemas com restrições são da forma

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s. a} \quad & f_E(x) = \bar{0} \\ & f_I(x) \leq \bar{0} \end{aligned}$$

onde $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f_E : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ e $f_I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m-p}$. Neste trabalho, consideramos que as funções f_0 , f_E e f_I são ao menos continuamente diferenciáveis.

Para o caso mais geral, há três grandes classes de métodos [8] para resolver o problema: penalidade ou barreira; programação quadrática seqüencial; e gradiente reduzido generalizado ou restauração inexata.

Os métodos de penalidade ou barreira são processos iterativos que resolvem, a cada iteração, um problema irrestrito cuja função objetivo é a função objetivo original acrescida de uma função – a penalidade ou barreira – construída a partir das restrições. Uma discussão sobre esses métodos pode ser encontrada em [1, 12, 15, 17, 19].

Os métodos de programação quadrática seqüencial são algoritmos iterativos que resolvem, a cada iteração, um problema cuja função objetivo é um modelo

quadrático da função objetivo original. Na Seção 2.6.1 é apresentado um método de programação quadrática seqüencial para problemas com restrições de igualdade que adota uma região de confiança para o modelo quadrático a cada iteração. Uma discussão mais geral pode ser vista em [1, 3, 5, 12, 15].

Os métodos de restauração inexata e de gradiente generalizado tratam a minimização da função objetivo e a aproximação ao conjunto viável como objetivos independentes. Cada iteração do método é composta de uma fase de viabilidade, que diminui uma certa medida de inviabilidade adotada, e uma fase de otimalidade, que reduz o valor da função objetivo. Na Seção 2.6.2 é apresentado um método de restauração inexata proposto por Martínez [13] e Martínez e Pilotta [14] para problemas com restrições de igualdade.

Na Seção 3.3 serão discutidas algumas propriedades de problemas quadráticos em uma bola. São apresentados dois métodos que obtêm uma solução aproximada para tais problemas, o método *dogleg* a aproximação de Steihaug, esta última resultante de algumas modificações do método do gradiente conjugado apresentado na Seção 3.2.2. No Capítulo 4 serão estudados três problemas restritos particulares.

2.6.1 Programação quadrática seqüencial

A programação quadrática seqüencial [16, Capítulo 18] é uma abordagem para a resolução de problemas com restrições em que a cada iteração é resolvido um subproblema quadrático. Ela é voltada para problemas cuja função objetivo possui não-linearidades significativas. Apresentamos uma possível forma de construir um algoritmo de programação quadrática seqüencial para problemas com restrições de igualdade. De certo modo, o método apresentado a seguir baseia-se nos métodos de região de confiança apresentados na Seção 2.5.1.

Para abordar o método, caracterizaremos o problema a resolver e algumas propriedades relativas ao problema e a suas soluções.

Caracterização do problema

Seja o problema

$$\begin{array}{ll}
 \text{(E)} & \min \quad f_0(x) \\
 & \text{s. a} \quad f(x) = \bar{0}
 \end{array}$$

onde $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ são suaves. Supomos $m < n$, ou seja, o número de restrições é menor que a dimensão do espaço \mathbb{R}^n .

A jacobiana da função f é a função $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ dada por

$$A(x) = \begin{bmatrix} (\nabla f_1(x))^T \\ (\nabla f_2(x))^T \\ \vdots \\ (\nabla f_m(x))^T \end{bmatrix}.$$

A função lagrangeano $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ associada ao problema (E) é

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f_0(x) + \lambda^T f(x). \quad (2.2)$$

O gradiente da função em relação à variável x é

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = \nabla f_0(x) + A^T(x) \lambda.$$

A hessiana em relação à variável x é dada por

$$W(x, \lambda) = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) = \nabla^2 f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla^2 f_i(x).$$

Se $x^* \in \mathbb{R}^n$ é uma solução do problema (E) e os vetores $\nabla f_1(x^*)$, $\nabla f_2(x^*)$, \dots , $\nabla f_m(x^*)$ são linearmente independentes, então, pelo Teorema 2.5, existe um vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ tal que $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \bar{0}$, isto é,

$$\nabla f_0(x^*) + A^T(x^*) \lambda = \bar{0}. \quad (2.3)$$

Significa que o gradiente $\nabla f_0(x^*)$ é uma combinação linear dos gradientes $\nabla f_1(x^*)$, $\nabla f_2(x^*)$, \dots , $\nabla f_m(x^*)$. Por hipótese, como o ponto x^* é regular, o vetor λ^* é único.

Modelagem do subproblema

Em geral, os métodos de minimização irrestrita para funções continuamente diferenciáveis visam encontrar pontos que anulam o gradiente da função objetivo. Baseado nisso, os métodos de programação quadrática seqüencial procuram mini-

mizar a função lagrangeano procurando por um ponto x^* que anule o gradiente da função. Significa procurar um ponto viável que satisfaz as condições de Karush-Kuhn-Tucker .

Como a condição expressa em (2.3) é necessária para um ponto regular ser uma solução, a estratégia adotada nos métodos de programação quadrática seqüencial é estabelecer um algoritmo que resolve, a cada iteração, um modelo quadrático da função lagrangeano (2.2) em torno do ponto corrente.

Como o ponto inicial e os pontos obtidos a cada iteração podem ser não viáveis, para garantir a viabilidade da solução, a função f que caracteriza as restrições do problema (E) também é modelada, e o ponto encontrado a cada iteração deve satisfazer o modelo das restrições.

Apresentamos a seguir um método de programação quadrática seqüencial, adotando uma região de confiança para o modelo da função lagrangeano e um modelo linear para as restrições.

Na iteração k , estabelecemos como um primeiro modelo quadrático para a função lagrangeano \mathcal{L} em torno do ponto corrente x^k os três primeiros termos série de Taylor de \mathcal{L} em x^k , para um certo multiplicador de Lagrange λ^k :

$$\mathcal{L}(x^k + p, \lambda^k) \approx \mathcal{L}(x^k, \lambda^k) + (\nabla f_0^k)^T p + (\lambda^k)^T A_k p + \frac{1}{2} p^T W_k p$$

onde $p \in \mathbb{R}^n$ é o passo a ser dado, $f_0^k = f_0(x^k)$, $\nabla f_0^k = \nabla f_0(x^k)$, $A_k = A(x^k)$ e $W_k = W(x^k, \lambda^k)$.

Um modelo linear para as restrições pode ser obtido dos dois primeiros termos da série de Taylor da função f em torno do ponto x^k :

$$f(x^k + p) \approx f^k + A_k p$$

onde $f^k = f(x^k)$.

Assim, na iteração k devemos procurar por um ponto p^k que minimiza um modelo quadrático da função lagrangeano sujeito a uma linearização das restrições e a uma região de confiança. Antes de formalizar o subproblema, lembramos que se duas funções diferem de um termo constante, então elas possuem os mesmos minimizadores. Observamos também que se o passo p satisfaz a restrição $f^k + A_k p = \bar{0}$, então o termo $A_k p$ é constante para cada índice k .

Dessa forma, o subproblema a ser resolvido na iteração k é

$$\begin{aligned}
& \min \quad \frac{1}{2}p^T W_k p + (\nabla f_0^k)^T p \\
\text{(PQS)} \quad & \text{s. a} \quad f^k + A_k p = \bar{0} \\
& \|p\| \leq \Delta_k
\end{aligned}$$

onde $\Delta_k > 0$ é o raio da região de confiança a cada iteração. Na função objetivo foram retirados os termos constantes presentes no primeiro modelo quadrático da função lagrangeano. Observamos que, para fins computacionais, a hessiana W_k é substituída por uma aproximação $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nas iterações, uma vez que o cômputo de W_k é em geral caro em relação ao algoritmo como um todo.

Discutiremos nas próximas seções como resolver o subproblema (PQS) a cada iteração. Abordaremos também como obter uma estimativa para o multiplicador de Lagrange λ^k .

Resolução do subproblema

Nesta seção abordamos a resolução do subproblema (PQS), resultante da modelagem do problema (E) em torno do ponto corrente x^k para um certo multiplicador de Lagrange λ^k .

Dados os conjuntos

$$L_k = \{p \in \mathbb{R}^n \mid A_k p + f^k = \bar{0}\}$$

$$\bar{B}_k = \{p \in \mathbb{R}^n \mid \|p\| \leq \Delta_k\}$$

o subproblema (PQS) pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
& \min \quad \frac{1}{2}p^T W_k p + (\nabla f_0^k)^T p \\
\text{(PQS)} \quad & \text{s. a} \quad p \in L_k \cap \bar{B}_k
\end{aligned}$$

onde a variedade linear L_k é a linearização das restrições do problema (E) em torno do ponto x^k , e a bola fechada \bar{B}_k é a região de confiança do modelo quadrático da função lagrangeano \mathcal{L} associado ao problema (E).

Os conjuntos L_k e \bar{B}_k podem ser disjuntos, tornando o problema (PQS) inviável na iteração k . Essa situação pode ser contornada de diversas formas. Uma delas é aumentar o raio da região de confiança. Tal estratégia não é adequada, pois pode comprometer significativamente o desempenho do processo iterativo, uma vez

que o objetivo do uso da região de confiança é o de garantir uma boa aproximação entre os valores da função a ser minimizada e de seu modelo.

Outra forma de tornar o conjunto viável do problema (PQS) não vazio na iteração k é transladar a variedade linear L_k de forma a obter um conjunto L'_k tal que $L'_k \cap \bar{B}_k \neq \emptyset$. Adotaremos essa estratégia, e discutiremos como formalizá-la.

TRANSLAÇÃO DE L_k E PASSO NORMAL

A translação do conjunto L_k pode ser obtida a partir da solução do sub-problema

$$\begin{aligned} \text{(PQSN)} \quad & \min \quad \|A_k v + f^k\| \\ & \text{s. a} \quad \|v\| \leq \zeta \Delta_k \end{aligned}$$

para um certo $\zeta \in \mathbb{R}$ com $0 < \zeta < 1$. Um valor típico é $\zeta = 0,8$. Esse problema corresponde ao problema (P3) analisado na Seção 4.4.

A solução do problema (PQSN) é única e seu vetor posição é um vetor ortogonal à variedade linear L_k . Por esse motivo, chamamos a solução v^k do problema (PQSN) de *passo normal*.

O conjunto L'_k é construído a partir do vetor v^k , fazendo

$$L'_k = \{p \in \mathbb{R}^n \mid A_k p = A_k v^k\}.$$

Desse modo, a variedade linear L'_k é uma translação de L_k , e $L'_k \cap \bar{B}_k \neq \emptyset$ pois $v^k \in L'_k \cap \bar{B}_k$.

PASSO TANGENCIAL

Uma vez obtido o conjunto L'_k , o problema (PQS) passa a ser

$$\begin{aligned} \text{(PQSP)} \quad & \min \quad \frac{1}{2} p^T W_k p + (\nabla f_0^k)^T p \\ & \text{s. a} \quad p \in L'_k \cap \bar{B}_k \end{aligned}$$

para um certo multiplicador de Lagrange λ^k .

Como $p \in L'_k$ se, e somente se,

$$p = v^k + t, \quad t \in \mathcal{N}(A_k), \quad (2.4)$$

tomando a matriz

$$Z_k \in \mathbb{R}^{n \times l_k}$$

em que suas colunas formam uma base ortonormal para o subespaço vetorial $\mathcal{N}(A_k)$ de dimensão l_k , temos que

$$t = Z_k u \quad u \in \mathbb{R}^{l_k} \quad (2.5)$$

e o ponto p é da forma

$$p = v^k + Z_k u.$$

Sendo o vetor v^k ortogonal a $\mathcal{N}(A_k)$ e $Z_k^T Z_k = I$, a norma euclidiana do vetor p é dada por

$$\|p\|^2 = \|v^k\|^2 + \|u\|^2.$$

Ainda por (2.4), a função objetivo do problema (PQSP) é

$$\frac{1}{2} p^T W_k p + (\nabla f_0^k)^T p = \frac{1}{2} t^T W_k t + t^T W_k v^k + \frac{1}{2} (v^k)^T W_k v^k + (\nabla f_0^k)^T t + (\nabla f_0^k)^T v^k.$$

Usando (2.4) e (2.5) e retirando os termos constantes da função objetivo, o problema (PQSP) passa a ser

$$\begin{aligned} \text{(PQST)} \quad & \min \quad \frac{1}{2} u^T Z_k^T W_k Z_k u + (W_k v^k + \nabla f_0^k)^T t \\ & \text{s. a} \quad \|u\| \leq \sqrt{\Delta^2 - \|v^k\|^2} \end{aligned}$$

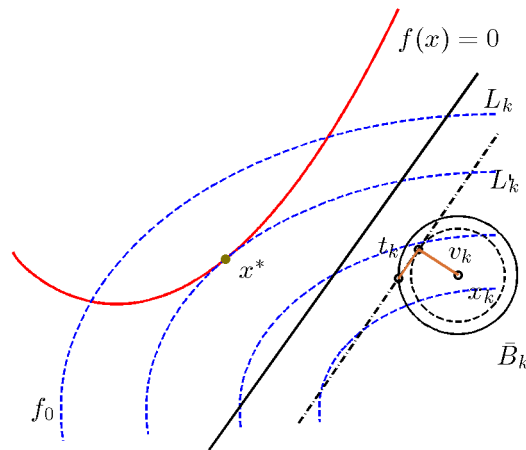
para um certo multiplicador de Lagrange λ^k . Na Seção 3.3 são apresentados dois métodos para obter uma solução aproximada, o método de *dogleg* e a aproximação de Steihaug.

Obtida a solução u^k do problema (PQST), o passo p^k é definido como

$$p^k = v^k + t^k, \quad t^k = Z_k u^k.$$

Como o vetor t^k é paralelo à variedade linear L'_k e ortogonal ao vetor v^k , ele é chamado de *passo tangencial*.

Para um certo multiplicador de Lagrange λ^k , a Figura 2.2 mostra a obtenção dos passos v^k e t^k em uma iteração k da programação quadrática seqüencial onde os conjuntos \bar{B}_k e L_k são disjuntos.



ESTIMATIVA PARA O MULTIPLICADOR DE LAGRANGE

$$\nabla f_0(x^*) + A^T(x^*)\lambda^* = \bar{0}.$$

Dado um ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, se \bar{x} não é uma solução do problema (E), uma estimativa para o multiplicador de Lagrange λ é obter uma solução do problema

$$\begin{aligned} \text{(PL)} \quad & \min \quad \|A^T(\bar{x})\lambda + \nabla f_0(\bar{x})\| \\ & \text{s. a} \quad \lambda \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

$$A(\bar{x})A^T(\bar{x})\lambda = -A(\bar{x})\nabla f_0(\bar{x}).$$

Assim, na iteração k definimos o vetor $\lambda^k \in \mathbb{R}^m$ como sendo um vetor tal

que

$$A_k A_k^T \lambda^k = -A_k \nabla f_0^k. \quad (2.6)$$

O vetor $A_k^T \lambda^k$ é a projeção do vetor ∇f_0^k no espaço gerado pelos vetores $\nabla f_1(x^k), \nabla f_2(x^k), \dots, \nabla f_m(x^k)$.

Aceitação do passo e atualização da região de confiança

Uma vez obtido o passo p^k na iteração k , é necessário avaliar se o ponto $x^k + p^k$ deve ou não ser aceito pelo algoritmo. Além disso, é preciso analisar se o raio da região de confiança deve ser mantido, aumentado ou diminuído.

Para avaliar a convergência do processo de solução, em geral é utilizada uma função de mérito que combina o valor da função objetivo com uma medida de inviabilidade do ponto. Uma função de mérito bastante usada é $\phi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\phi(x, \nu) = f_0(x) + \nu \|f(x)\|$$

onde o escalar $\nu > 0$ é o *parâmetro de penalidade* e $\|f(x)\|$ é a *medida de inviabilidade* do ponto $x \in \mathbb{R}^n$.

O parâmetro de penalidade atribui um peso para a medida de inviabilidade. Ele pode ser fixo ou mudar a cada iteração de forma a priorizar o decréscimo da função objetivo ou da medida de inviabilidade promovida pelo passo a ser dado.

A avaliação é feita verificando se o ponto $x^k + p^k$ reduz satisfatoriamente a função de mérito ϕ em relação ao ponto x^k . Para isso, tomamos a redução verdadeira da função de mérito,

$$ared_k = \phi(x^k + p^k, \nu_k) - \phi(x^k, \nu_k)$$

e uma redução predita pelos modelos da função objetivo e das restrições, $pred_k$.

Se $ared_k > \eta pred_k$ para um certo parâmetro $\eta \in (0; 1)$, o passo é aceito e o raio da região de confiança pode ser aumentado. Caso contrário, o passo é rejeitado e a região de confiança é reduzido.

Algoritmo

Com base no que foi exposto anteriormente, é possível estabelecer um algoritmo de programação quadrática sequencial para resolver o problema (E). O critério

de parada adotado é o de o ponto corrente ser viável e satisfazer as condições de Karush-Kuhn-Tucker .

Algoritmo 2.10 *Programação quadrática seqüencial*

Dados $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\Delta_0 > 0$, $\varepsilon > 0$, $\zeta = 0,8$, $\eta, \nu \in (0;1)$.

$k = 0$

$$f_0^k = f_0(x^k)$$

$$f^k = f(x^k)$$

$$\nabla f_0^k = \nabla f_0(x^k)$$

$$A_k = A(x^k)$$

Obter λ^k por (2.6).

Enquanto $\|\nabla f_0^k + A_k^T \lambda^k\| > \varepsilon$ ou $\|f^k\| > \varepsilon$

Obter v^k resolvendo o problema (PQSN).

Obter a matriz Z_k cujas colunas formam uma base ortonormal de $\mathcal{N}(A_k)$.

$$W_k = W(x^k, \lambda^k)$$

Obter u^k resolvendo o problema (PQST).

$$p^k = v^k + Z_k u^k$$

Obter $ared_k$ e $pred_k$.

Se $ared_k > \eta pred_k$

$$x^{k+1} = x^k + p^k$$

Escolher Δ_{k+1} que satisfaz $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$.

Senão

$$x^{k+1} = x^k$$

Escolher Δ_{k+1} que satisfaz $\Delta_{k+1} \leq \nu \|p^k\|$;

$$k = k + 1$$

$$f_0^k = f_0(x^k)$$

$$f^k = f(x^k)$$

$$\nabla f_0^k = \nabla f_0(x^k)$$

$$A_k = A(x^k)$$

Fim do enquanto.

Na Seção 2.6.2 é apresentado o método de restauração inexata para resolver problemas com restrições de igualdade. Ele é construído a partir de uma flexibilização do método de programação quadrática seqüencial apresentado acima.

2.6.2 Restauração inexata

Nesta seção discutiremos o método de restauração inexata descrito por Martínez [13] e Martínez e Pilotta [14]. Ele será apresentado a partir de uma análise da estrutura do método de programação quadrática seqüencial abordado na Seção 2.6.1.

Estrutura do método de programação quadrática seqüencial

No método de programação quadrática seqüencial, na iteração k , o passo p^k é obtido a partir do problema (PQS), desmembrado nos problemas (PQSN) e (PQST). O passo normal v^k , solução do problema (PQSN), é ortogonal à linearização das restrições em torno do ponto x^k . O passo tangencial t^k , solução do problema (PQST), é paralelo à linearização das restrições. O passo total é dado por

$$p^k = v^k + t^k.$$

Caso o passo p^k não permita reduzir suficientemente a função de mérito do método, ele é rejeitado e um novo passo é procurado dentro de uma região de confiança de raio menor.

O ponto $x^k + v^k$ é mais próximo da linearização das restrições do que o ponto x^k . O valor da função objetivo no ponto $x^k + v^k + t^k$ é menor que o seu valor no ponto $x^k + v^k$. Por tais motivos, o processo de obtenção do ponto v^k é chamado de *fase de viabilidade* do método de programação quadrática seqüencial na iteração k , e o processo de obtenção do passo t^k é chamado de *fase de otimalidade*. Em ambas as fases, o centro da região de confiança é o ponto x^k .

O método de restauração inexata propõe mudanças nas fases de viabilidade e otimalidade da iteração, de forma a torná-las mais independentes e flexíveis do ponto de vista de implementação.

Estrutura do método de restauração inexata

O método de restauração inexata foi proposto por Martínez e Pilotta [14]. Discussões sobre convergência global podem ser encontradas em [13] e [14]. Uma discussão sobre convergência local do método é feita por Birgin e Martínez [2]. Nesse método, as fases de viabilidade e de otimalidade da iteração são tratadas de forma mais independente que no método de programação quadrática seqüencial.

A aproximação do ponto corrente para um modelo do conjunto viável promovida na fase de viabilidade, que será visto adiante, é chamada de *restauração inexata* do ponto corrente. A medida de inviabilidade adotada é a norma euclidiana do valor da função f . A função de mérito usada é $\phi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\phi(x, \nu) = f_0(x) + \nu \|f(x)\|.$$

Na fase de viabilidade da iteração k , se o ponto corrente x^k não é viável, pode ser usado qualquer método que permita encontrar um ponto $z^k \in \mathbb{R}^n$ de modo a

$$\|f(z^k)\| < \|f(x^k)\|$$

e que atenda alguns critérios utilizados para garantir a convergência global. Se x^k é viável, toma-se $z^k = x^k$. Nenhuma região de confiança é adotada nessa fase.

Na fase de otimalidade da iteração k , é obtido o conjunto da linearização das restrições em torno do ponto z^k ,

$$L(z^k) = \mathcal{N}(A(z^k)).$$

Uma bola fechada $\bar{B}_k = \{t \in \mathbb{R}^n \mid \|t\| \leq \Delta_k\}$ é adotada como região de confiança para os possíveis passos a serem dados a partir de z^k . A fase de otimalidade procura um passo

$$t^k \in L(z^k) \cap \bar{B}_k$$

que reduz o valor da função lagrangeano para um multiplicador de Lagrange estimado em z^k . O fato de o vetor t^k ser paralelo à variedade linear $L(z^k)$ limita a perda de viabilidade promovida pelo passo. O ponto $z^k + t^k$ é avaliado pela função de mérito. Se ele é rejeitado, o raio Δ_k é reduzido e a fase de otimalidade é repetida. Caso contrário, o passo t^k é aceito e

$$x^{k+1} = z^k + t^k.$$

Observamos que o centro da região de confiança nessa fase é o ponto z^k .

A Figura 2.3 ilustra uma iteração do método.

Veremos a seguir algumas propostas para a fase de viabilidade do método de restauração inexata.

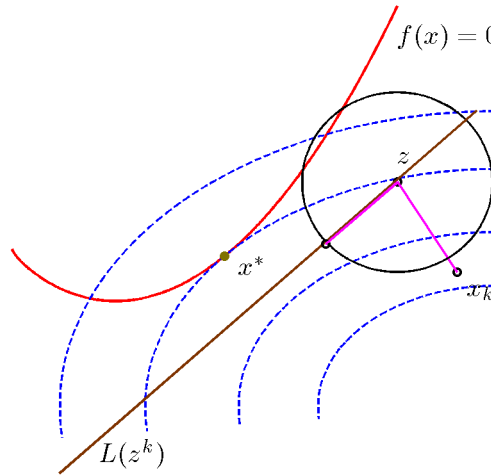


Figura 2.3: Uma iteração da método de restauração inexata.

Métodos para a fase de viabilidade

Vários algoritmos internos podem ser adotados para a fase de viabilidade, uma vez que o método de restauração inexata não especifica como a fase deve ser efetuada. Uma possibilidade é obter um ponto z^k que minimize um modelo da função $h = \|f\|$ em torno do ponto x^k .

Veremos na sequência outra possibilidade para o método interno da fase de viabilidade. Dado o ponto $x^k \in \mathbb{R}^n$, tomamos a linearização das restrições em torno do ponto,

$$f(x^k + v) \approx f^k + A_k v,$$

e construímos o conjunto

$$\hat{L}_k = \{v \in \mathbb{R}^n \mid A_k v = -f^k\}.$$

Daí, obtemos a projeção ortogonal do ponto x^k na variedade linear

$$\hat{L}'_k = \{z \in \mathbb{R}^n \mid z = x^k + v; v \in \hat{L}_k\},$$

que corresponde a resolver o problema

$$\begin{array}{ll}
 \text{(RIV)} & \min \quad \|v\| \\
 & \text{s. a } v \in \hat{L}_k
 \end{array}$$

para obter o passo v^k . O problema (RIV) corresponde ao problema (P1) discutido na Seção 4.2. Uma vez encontrada a solução v^k , o ponto z^k é definido como

$$z^k = x^k + v^k.$$

Caso $\hat{L}_k = \emptyset$, pode-se usar como alternativa para obter o passo v^k resolver o problema

$$\begin{array}{ll}
 \text{(RIV2)} & \min \quad \|A_k v + f^k\| \\
 & \text{s. a } v \in \mathbb{R}^n
 \end{array}$$

Esse problema corresponde ao problema (PQSN) sem restrições, e ao problema (P3I) abordado na Seção 4.4.2.

Capítulo 3

Problemas quadráticos

O interesse no estudo da minimização de funções quadráticas reside no grande número de aplicações que recaem nesse formato. Em programação não linear, problemas quadráticos freqüentemente são usados como subproblemas auxiliares nos algoritmos, como pode ser constatado nas Seções 2.5.1, 2.6.1 e 2.6.2. Nas Seções 4.2.2, 4.4.1 e 4.4.2 aparecem três importantes exemplos de problemas quadráticos.

Neste capítulo faremos uma discussão sobre problemas quadráticos baseada em [15]. Trataremos sobre problemas quadráticos irrestritos e com restrição de bola, muito comuns em programação não linear na resolução de problemas e subproblemas. Para a resolução de problemas quadráticos irrestritos, apresentaremos o método do gradiente conjugado. Abordaremos também dois métodos que obtêm uma solução aproximada para um problema quadrático em bola. São eles o método de *dogleg* e a aproximação de Steihaug, este último baseado no método do gradiente conjugado, apresentado na Seção 3.2.2.

3.1 O problema quadrático

Uma *função quadrática* é uma função $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ da forma

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Bx + g^T x + s \quad (3.1)$$

onde $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica não nula, $g \in \mathbb{R}^n$ e $s \in \mathbb{R}$.

Um *problema quadrático* é um problema de programação não linear cuja função objetivo é quadrática.

Nas próximas seções discutiremos sobre dois problemas irrestritos comumente encontrados nos métodos de programação não linear, os problemas quadráticos irrestritos e os com restrição de bola. Veremos algumas propriedades e abordaremos métodos para resolver problemas quadráticos.

3.2 Problemas quadráticos irrestritos

Um problema quadrático irrestrito é da forma

$$\begin{aligned} \text{(PQI)} \quad & \min \quad q(x) = \frac{1}{2}x^T Bx + g^T x + s \\ & \text{s. a } x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

O gradiente da função objetivo em (PQI) é $\nabla q(x) = Bx + g$, e a hessiana é $\nabla^2 q(x) = B$.

Um *ponto estacionário* de uma função derivável é um ponto que anula o seu gradiente. Todo ponto minimizador é estacionário, mas nem todo ponto estacionário é um minimizador.

Quando não há um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ de modo que $Bx + g = \bar{0}$, a função quadrática q não possui minimizadores locais. Isso ocorre se, e somente se, $g \notin \text{Im}(B)$. A função admite um ponto estacionário único se, e somente se, a matriz B é não singular.

Quando a matriz B é semidefinida positiva, todos os minimizadores são globais, conforme mostra o lema abaixo. Vale ressaltar que quando B é definida positiva, há um único minimizador global dado por $x^* = -B^{-1}g$.

Lema 3.1 *Dado o problema (PQI), se a matriz B é semidefinida positiva então todo minimizador local da função q é um minimizador global. Se a matriz B é definida positiva, o minimizador global é único.*

Prova. Seja x^* um minimizador local. Então $\nabla q(x^*) = \bar{0}$, isto é, $Bx^* = -g$. Tomando um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ qualquer distinto de x^* , temos que

$$\begin{aligned} q(x) - q(x^*) &= \frac{1}{2}x^T Bx + g^T x - \frac{1}{2}(x^*)^T Bx^* - g^T x^* \\ &= \frac{1}{2}x^T Bx + g^T (x - x^*) - \frac{1}{2}(x^*)^T Bx^* \\ &= \frac{1}{2}x^T Bx - (x^*)^T B(x - x^*) - \frac{1}{2}(x^*)^T Bx^* \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}x^T Bx - (x^*)^T Bx + \frac{1}{2}(x^*)^T Bx^*$$

Logo,

$$q(x) - q(x^*) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T B(x - x^*) \geq 0 \quad (3.2)$$

Portanto, o ponto x^* é um minimizador global.

Se a matriz B é definida positiva, a desigualdade em (3.2) é estrita, ou seja,

$$q(x) - q(x^*) > 0$$

e portanto o minimizador global é único. \square

Apresentaremos a seguir um problema bastante comum em investigação científica, o problema dos quadrados mínimos. Trata-se de um problema que, de acordo com a formulação, recai num problema quadrático irrestrito. Após, apresentaremos um método para a resolução de problemas irrestritos quando a hessiana da função quadrática é definida positiva. É o método do gradiente conjugado.

3.2.1 Problema dos quadrados mínimos discreto

Um problema comum em investigação científica é o de achar uma curva que ‘ajusta’ um conjunto de dados discreto [18, Seção 3.1]. Normalmente, há um número n de pontos $(t_1, y_1), (t_2, y_2), \dots, (t_n, y_n)$ coletados de algum experimento científico e, por alguma consideração teórica ou pela disposição dos pontos, deseja-se encontrar uma função $\Upsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ de forma que

$$\Upsilon(t_i) = y_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.3)$$

Essa função pode ser do tipo polinomial, exponencial, trigonométrica ou outra.

Devido à imprecisão dos dados experimentais, em geral não é possível encontrar uma função do tipo especificada que passa por todos os pontos. Por conta disso, busca-se uma função $\Upsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ que passe o mais próximo possível dos pontos segundo algum critério.

Seja e_i o i -ésimo *desvio*, ou *resíduo*, dado por

$$e_i = y_i - \Upsilon(t_i).$$

Especificando uma norma em \mathbb{R}^n , é possível resolver o problema da curva de ajuste ao encontrar o *vetor de resíduos*, ou *vetor de desvios*,

$$e = [e_1, e_2, \dots, e_n]^T \quad (3.4)$$

de menor norma.

Se a função $\Upsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é um elemento de um espaço de funções reais de base $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m$, então a função pode ser expressa por uma combinação linear

$$\Upsilon = x_1\phi_1 + x_2\phi_2 + \dots + x_m\phi_m$$

onde x_1, x_2, \dots, x_m são os escalares a determinar.

Uma vez que o número de dados é tipicamente grande e a base do espaço de funções é em geral formada por poucos elementos, supomos que necessariamente $n > m$.

Tomando

$$A = \begin{bmatrix} \phi_1(t_1) & \phi_2(t_1) & \cdots & \phi_m(t_1) \\ \phi_1(t_2) & \phi_2(t_2) & \cdots & \phi_m(t_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(t_n) & \phi_2(t_n) & \cdots & \phi_m(t_n) \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

as equações em (3.3) correspondem a $Ax = b$, e o vetor de desvios e em (3.4) é $e = b - Ax$.

Considerando a norma euclidiana, encontrar a curva de ajuste traduz-se em resolver o problema de programação não linear

$$\begin{aligned} \text{(QM1)} \quad & \min \quad \|b - Ax\| \\ & \text{s. a } x \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

que equivale ao problema quadrático irrestrito

$$\begin{aligned} \text{(QM2)} \quad & \min \quad q(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 \\ & \text{s. a } x \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

O problema (QM2) é chamado de *problema dos quadrados mínimos discreto*. Existem várias técnicas desenvolvidas nas áreas de programação não linear e álgebra

linear numérica para resolver o problema.

Os próximos lemas versam sobre a existência de uma solução para o problema (QM2) e sua unicidade. Observamos que

$$\nabla q(x) = A^T Ax - A^T b.$$

Lema 3.2 *O problema (QM2) sempre possui uma solução.*

Prova. Seja o conjunto solução G dado por

$$G = \{x \in \mathbb{R}^m \mid \nabla q(x) = \bar{0}\}.$$

Então

$$G = \{x \in \mathbb{R}^m \mid A^T Ax = A^T b\}.$$

Pela Proposição 1.13, o conjunto G não é vazio. □

Lema 3.3 *Dados a matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ com $n > m$ e o vetor $b \in \mathbb{R}^n$, o problema (QM2) possui uma única solução se, e somente se, a matriz A é de posto completo. Nessa situação, a solução é $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$.*

Prova. Se $x^* \in \mathbb{R}^n$ é tal que $\nabla q(x^*) = \bar{0}$ então todas as soluções do problema (QM2) são da forma $x^* + v$ com $v \in \mathcal{N}(A^T A) = \mathcal{N}(A)$.

Quando a matriz A é de posto completo, seu posto é m . Daí, a nulidade da matriz é zero, ou seja, $\mathcal{N}(A) = \{\bar{0}\}$. Logo, a solução é única e dada por

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Caso a matriz A não é de posto completo, o subespaço vetorial $\mathcal{N}(A)$ possui vetores não nulos, e portanto há mais de uma solução para o problema. □

O problema (QM2) é semelhante ao problema (P3I) apresentado na Seção 4.4.2. Apesar de a matriz A do problema (P3I) possuir menos linhas que colunas, e a matriz A do problema (QM2) possuir mais linhas que colunas, a análise do problema (P3I) é válida também para o problema (QM2).

3.2.2 Método do gradiente conjugado

Dados uma matriz $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida positiva e um vetor $g \in \mathbb{R}^n$, o método do gradiente conjugado é um processo iterativo para encontrar a solução da equação

$$Bx = g.$$

Segundo o Lema 3.1, equivale a encontrar o minimizador global da função quadrática $q : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Bx - g^T x. \quad (3.5)$$

Chamamos de *função resíduo*, ou simplesmente *resíduo*, a função $e : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ expressa por

$$e(x) = Bx - g. \quad (3.6)$$

Observamos que $\nabla q(x) = e(x)$.

Alguns lemas referentes ao método do gradiente conjugado serão enunciados sem prova. As demonstrações podem ser encontradas em Nocedal e Wright [16, Capítulo 5], e em Luenberger [12, Capítulo 8].

Direções conjugadas

Nesta seção veremos que é possível estabelecer um procedimento de minimizações sucessivas da função q em (3.5) até atingir seu minimizador global.

Consideramos um conjunto de vetores não nulos

$$P = \{d^0, d^1, \dots, d^{n-1}\} \in \mathbb{R}^n \quad (3.7)$$

conjugados pela matriz definida positiva $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, isto é, $(d^i)^T A d^j$ para $i \neq j$. Esses vetores formam uma base para o espaço \mathbb{R}^n .

Dados $y, d \in \mathbb{R}^n$ e a função q em (3.5), tomamos a função $\tilde{q} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida como

$$\tilde{q}(\alpha) = q(y + \alpha d).$$

A função \tilde{q} assume o menor valor no ponto

$$\alpha^* = - \frac{d^T e(y)}{d^T B d} \in \mathbb{R},$$

onde e é o resíduo dado em (3.6). Ou seja, o ponto $y + \alpha^* d \in \mathbb{R}^n$ minimiza a função q na reta dada pelos pontos y e $y + d$.

Assim, considerando a função q em (3.5) e a base P em (3.7), tomamos um ponto $x^0 \in \mathbb{R}^n$ definimos os pontos $x^1, x^2, \dots, x^n \in \mathbb{R}^n$ de modo que

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k, \quad k = 0, \dots, n-1 \quad (3.8)$$

onde

$$\alpha_k = - \frac{(d^k)^T e^k}{(d^k)^T A d^k} \quad \text{e} \quad e^k = e(x^k), \quad (3.9)$$

com o resíduo e indicado em (3.6). O ponto x^{k+1} minimiza a função q na reta dada pelos pontos x^k e $x^k + d^k$.

Usando (3.6), (3.8) e (3.9), é possível afirmar que

$$e^{k+1} = e^k + \alpha_k A d^k. \quad (3.10)$$

O lema abaixo mostra que o conjunto de pontos definidos acima conduzem ao minimizador da função q no domínio \mathbb{R}^n , qualquer que seja o ponto inicial x^0 .

Lema 3.4 *Seja a função q em (3.5) e uma base P do espaço \mathbb{R}^n conforme (3.7). Para qualquer ponto $x^0 \in \mathbb{R}^n$, o conjunto de pontos dados por (3.8) conduzem ao minimizador global x^* da função q em \mathbb{R}^n , isto é, $x^* = x^n$.*

Prova. Uma vez que $x^* - x^0 \in \mathbb{R}^n$, existem os escalares únicos $\sigma_0, \dots, \sigma_{n-1}$ tais que

$$x^* - x^0 = \sigma_0 d^0 + \sigma_1 d^1 + \dots + \sigma_{n-1} d^{n-1}.$$

De acordo com (3.8) e (3.9),

$$x^n - x^0 = \alpha_0 d^0 + \alpha_1 d^1 + \dots + \alpha_{n-1} d^{n-1}.$$

Para provar que $x^* = x^n$, basta mostrar que $\sigma_k = \alpha_k$ para $k = 0, \dots, n-1$.

Como os vetores da base P são B -ortogonais, $(d^k)^T B(x^* - x^0) = \sigma_k (d^k)^T B(d^k)$ para $k = 0, \dots, n-1$, isto é,

$$\sigma_k = \frac{(d^k)^T B(x^* - x^0)}{(d^k)^T B(d^k)} \quad (3.11)$$

Conforme (3.8),

$$x^k - x^0 = \alpha_0 d^0 + \alpha_1 d^1 + \dots + \alpha_{k-1} d^{k-1}.$$

Assim, para $k = 0, \dots, n-1$,

$$(d^k)^T B(x^k - x^0) = 0.$$

Logo, considerando $x^* - x^0 = (x^* - x^k) + (x^k - x^0)$ e $Bx^* = g$, pois $\nabla q(x^*) = \bar{0}$,

$$(d^k)^T B(x^* - x^0) = (d^k)^T B(x^* - x^k) = (d^k)^T (g - Bx^k).$$

Com isso, de acordo com (3.11) e (3.9),

$$\sigma_k = - \frac{(d^k)^T (Bx^k - g)}{(d^k)^T B(d^k)} = \alpha_k.$$

Portanto, $x^* = x^n$. □

Como visto acima, no conjunto de pontos gerados por (3.8), o ponto x^{k+1} minimiza a função q ao longo da reta paralela ao vetor d^k e que passa pelo ponto x^k . O próximo lema afirma que o ponto x^{k+1} é o minimizador global da função q na variedade linear formada pelos vetores d^0, d^1, \dots, d^k e pelo ponto x^0 . Observamos que essa variedade linear contém a reta definida pelo ponto x^k e pelo vetor d^k . Mais ainda, o gradiente da função q no ponto x^{k+1} é ortogonal à variedade linear.

Lema 3.5 *Sejam a função q definida em (3.5) e seu gradiente representado pela função resíduo e em (3.6), e uma base P do espaço \mathbb{R}^n conforme (3.7). Para qualquer ponto $x^0 \in \mathbb{R}^n$, o conjunto de pontos dado por (3.8) é tal que, para $k = 0, \dots, n-1$:*

- 1) x^{k+1} é o minimizador global da função q na variedade linear

$$L_k = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = x^0 + \sigma_0 d^0 + \dots + \sigma_k d^k; \sigma_0, \dots, \sigma_k \in \mathbb{R}\};$$

$$2) (e^{k+1})^T d^j = 0, \text{ para } j = 0, \dots, k.$$

Os métodos baseados na obtenção do conjunto de pontos conforme (3.8) a partir de uma base P segundo (3.7) são chamados de *métodos de direções conjugadas*. O método do gradiente conjugado é um deles.

O algoritmo do gradiente conjugado

Na seção anterior, vimos que dado um ponto inicial $x^0 \in \mathbb{R}^n$, é possível minimizar a função quadrática q dada em (3.5) através da geração de uma sequência de pontos x^1, \dots, x^n conforme (3.8) a partir de uma base P de vetores conjugados em B como em (3.7).

Uma vez que a base é arbitrária – basta atender ao critério de conjugação pela matriz definida positiva B –, e a obtenção do ponto x^k depende somente dos primeiros k vetores da base, não é necessário estabelecer previamente o conjunto P . Isso permite a base poder ser construída iterativamente de forma que, quando se obtém o ponto x^k , o vetor d^k também é obtido por algum critério.

O *método do gradiente conjugado* obtém o vetor d^k usando somente os vetores d^{k-1} , da base, e e^k , gradiente da função objetivo no ponto x^k . Isso torna desnecessário armazenar todos os vetores da base P . O vetor d^k é definido como

$$d^k = -e^k + \beta_k d^{k-1} \quad (3.12)$$

para um certo escalar $\beta \in \mathbb{R}$. O escalar é definido ao impôr ao vetor d^k a condição $(d^k)^T B d^{k-1} = 0$. Assim,

$$\beta_k = \frac{(e^k)^T B d^{k-1}}{(d^{k-1})^T B d^{k-1}} \quad (3.13)$$

Tomamos como vetor inicial da base o oposto do gradiente e no ponto x^0 :

$$d^0 = -e^0.$$

Quando o ponto x^k não é o minimizador da função objetivo, $e^k \neq \bar{0}$. Pelo Lema 3.5, o vetor e^k é ortogonal aos vetores d^0, \dots, d^{k-1} . Daí, por (3.12) e (3.13) o vetor d^k é linearmente independente de d^0, \dots, d^{k-1} e é conjugado pela matriz B com o vetor d^{k-1} .

A partir do que foi discutido acima, podemos estabelecer o seguinte algoritmo preliminar:

Algoritmo 3.6 *Gradiente conjugado, versão preliminar*

Dados $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida positiva, $g \in \mathbb{R}^n$, $x^0 \in \mathbb{R}^n$.

$$e^0 = Bx^0 - g$$

$$d^0 = -e^0$$

$k = 0$

Enquanto $e^k \neq \bar{0}$:

$$\alpha_k = - \frac{(e^k)^T d^k}{(d^k)^T B d^k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$$

$$e^{k+1} = Bx^{k+1} - g$$

$$\beta_{k+1} = \frac{(e^{k+1})^T B d^k}{(d^k)^T B d^k}$$

$$d^{k+1} = -e^{k+1} + \beta_{k+1} d^k$$

$$k = k + 1$$

Fim do enquanto.

O teorema abaixo afirma que o algoritmo gera um conjunto de pontos x^k que converge para o minimizador global x^* da função quadrática q dada em (3.5). Além disso, garante que os vetores d^0, \dots, d^k são conjugados pela matriz definida positiva B , e exibe uma outra forma de se obter os escalares α_k e β_k .

Teorema 3.7 *Seja o Algoritmo 3.6. Se o ponto x^k não é o minimizador global da função quadrática q dada em (3.5), então:*

- 1) *os espaços gerados pelos vetores e^0, \dots, e^k e pelos vetores $e^0, Be^0, \dots, B^k e^0$ são iguais;*
- 2) *os espaços gerados pelos vetores d^0, \dots, d^k e pelos vetores $e^0, Be^0, \dots, B^k e^0$ são iguais;*
- 3) *$(d^k)^T B d^j = 0$ para $j = 0, \dots, k-1$;*
- 4) $\alpha_k = \frac{(e^k)^T e^k}{(d^k)^T B d^k};$
- 5) $\beta_{k+1} = \frac{(e^{k+1})^T e^{k+1}}{(e^k)^T e^k}.$

A partir do teorema acima e de (3.10), podemos escrever a forma padrão do algoritmo do método do gradiente conjugado.

Algoritmo 3.8 *Gradiente conjugado*

Dados $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida positiva, $g \in \mathbb{R}^n$, $x^0 \in \mathbb{R}^n$.

$$e^0 = Bx^0 - g$$

$$d^0 = -e^0$$

$$k = 0$$

Enquanto $e^k \neq \bar{0}$:

$$\begin{aligned}\alpha_k &= \frac{(e^k)^T e^k}{(d^k)^T B d^k} \\ x^{k+1} &= x^k + \alpha_k d^k \\ e^{k+1} &= e^k + \alpha_k B d^k \\ \beta_{k+1} &= \frac{(e^{k+1})^T e^{k+1}}{(e^k)^T e^k} \\ d^{k+1} &= -e^{k+1} + \beta_{k+1} d^k \\ k &= k + 1\end{aligned}$$

Fim do enquanto.

3.3 Problemas quadráticos em uma bola

Um *problema quadrático em uma bola* é um problema de programação não linear em que uma função quadrática é minimizada em uma bola fechada centrada na origem. Corresponde a um problema da forma

$$\begin{aligned}(\text{PQB}) \quad & \min \quad q(x) = \frac{1}{2}x^T Bx + g^T x + s \\ & \text{s. a} \quad \|x\| \leq \Delta\end{aligned}$$

onde $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica não nula, $g \in \mathbb{R}^n$, $s \in \mathbb{R}$ e o escalar $\Delta > 0$ é o raio da bola.

Definindo

$$\Theta(x) = \frac{1}{2}(x^T x - \Delta^2),$$

o problema acima é equivalente a

$$\begin{aligned}(\text{PQB1}) \quad & \min \quad q(x) \\ & \text{s. a} \quad \Theta(x) \leq 0\end{aligned}$$

Associado ao problema (PQB1) há o problema

$$\begin{aligned}(\text{PQB2}) \quad & \min \quad q(x) \\ & \text{s. a} \quad \Theta(x) = 0\end{aligned}$$

Todos os pontos viáveis do problema (PQB1) são regulares, pois $\nabla \Theta(x) \neq \bar{0}$ para os pontos $x \in \mathbb{R}^n$ tais que $\Theta(x) = 0$.

Pelas condições de Karush-Kuhn-Tucker, se x^* é uma solução do problema (PQB1), então existe um escalar $\mu \in \mathbb{R}$ tal que

$$Bx^* + g + \mu x^* = \bar{0}$$

$$\mu \geq 0$$

$$\mu \Theta(x^*) = 0$$

O próximo lema fornece condições suficientes que garantem ser o ponto viável x^* uma solução do problema (PQB1) ou do (PQB2).

Lema 3.9 *Sejam $\mu \in \mathbb{R}$ e $x^* \in \mathbb{R}^n$ tais que a matriz $(B + \mu I)$ é semidefinida positiva e*

$$(B + \mu I)x^* = -g.$$

1) *Se $\mu = 0$ e $\|x^*\| \leq \Delta$, então x^* é uma solução do problema (PQB1).*

2) *Se $\|x^*\| = \Delta$ então x^* é uma solução do problema (PQB2).*

3) *Se $\mu \geq 0$ e $\|x^*\| = \Delta$, então x^* é uma solução do problema (PQB1).*

Além disso, se a matriz $B + \mu I$ é definida positiva, a solução é única.

Prova. Pelo Lema 3.1, o ponto x^* é um minimizador global da função quadrática

$$\hat{q}(x) = \frac{1}{2}x^T(B + \mu I)x + g^T x + s.$$

Logo, para todo ponto $x \in \mathbb{R}^n$,

$$\frac{1}{2}x^T(B + \mu I)x + g^T x + s \geq \frac{1}{2}(x^*)^T(B + \mu I)x^* + g^T x^* + s. \quad (3.14)$$

Daí, para todo ponto $x \in \mathbb{R}^n$,

$$q(x) \geq q(x^*) + \frac{\mu}{2}((x^*)^T x^* - x^T x). \quad (3.15)$$

As afirmações (1), (2), (3) são conseqüências imediatas de (3.15). Quando a matriz $B + \mu I$ é definida positiva, a desigualdade em (3.14) e (3.15) se torna estrita para $x \neq x^*$, isto é,

$$q(x) > q(x^*) + \frac{\mu}{2}((x^*)^T x^* - x^T x),$$

e portanto a solução é única. \square

Abordaremos a seguir dois métodos para obter uma solução aproximada para o problema (PQB). São os métodos de *dogleg* e da aproximação de Steihaug. Existem métodos que obtêm a solução exata do problema. Um deles resulta de trabalhos de Moré e Sorensen, e pode ser encontrado, por exemplo, em [5, Seção 7.3].

3.3.1 Método *dogleg*

Seja o problema

$$\begin{aligned} \text{(PQBD)} \quad & \min \quad q(x) = \frac{1}{2}x^T Bx + g^T x + s \\ & \text{s. a} \quad \|x\| \leq \Delta \end{aligned}$$

onde $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva, $g \in \mathbb{R}^n$, $s \in \mathbb{R}$ e o escalar $\Delta > 0$ é o raio da bola.

O método *dogleg* [16, Seção 4.1] tem como meta obter uma solução aproximada do problema (PQBD).

A função quadrática q assume o valor mínimo no ponto

$$x_N = -B^{-1}g.$$

Se o ponto x_N pertence à região de confiança, ele é a solução do problema (PQBD). Caso o ponto não pertença à região de confiança, podemos encontrar uma solução aproximada do problema conforme apresentado a seguir.

É construída uma trajetória formada por dois segmentos de reta. O primeiro segmento tem origem no ponto $\bar{0}$ e termina no minimizador irrestrito da função q na direção oposta à do gradiente em $\bar{0}$:

$$x_C = -\frac{g^T g}{g^T B g} g$$

O segundo segmento inicia no ponto x_C e termina no ponto x_N .

À medida que o ponto x percorre a trajetória, sua norma aumenta e o valor da função q no ponto decresce.

Assim, o método *dogleg* consiste em encontrar o minimizador da função quadrática q ao longo da trajetória e pertencente à região de confiança. A Figura 3.1 apresenta uma solução encontrada pelo método para uma certa função quadrática de hessiana definida positiva.

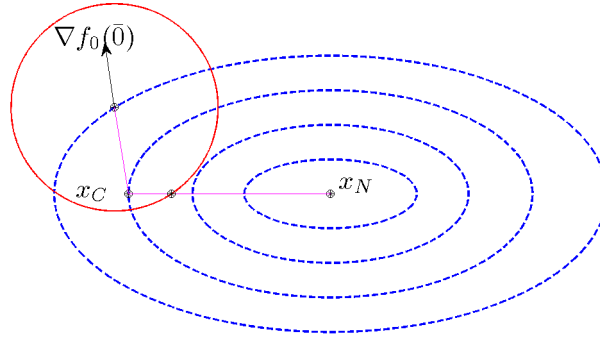


Figura 3.1: Método *dogleg*

No caso de a matriz B não ser positiva definida, mesmo que haja o ponto x_N , não é garantido o decréscimo do valor da função q ao longo da trajetória. Por conta disso, é necessário considerar outro método que permita reduzir o valor da função quadrática com a restrição de bola fechada.

3.3.2 Aproximação de Steihaug

Seja o problema

$$\begin{aligned} \text{(PQBS)} \quad & \min \quad q(x) = \frac{1}{2}x^T Bx - g^T x \\ & \text{s. a} \quad \|x\| \leq \Delta \end{aligned}$$

onde $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica não nula e $g \in \mathbb{R}^n$.

O método da aproximação de Steihaug [16, Seção 4.1] tem como objetivo obter uma solução aproximada de (PQBS) através da adaptação do método do gradiente conjugado, descrito na Seção 3.2.2.

O método do gradiente conjugado fornece o minimizador irrestrito da função quadrática q quando a matriz B é definida positiva. O método da aproximação de Steihaug permite encontrar uma solução aproximada do problema (PQBS) sem

exigir que a matriz B seja definida positiva. Isso é possível através da adoção de critérios de parada específicos no Algoritmo 3.8. O algoritmo da aproximação de Steihaug é apresentado abaixo.

Algoritmo 3.10 *Aproximação de Steihaug*

Dados $\varepsilon > 0$, $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $g \in \mathbb{R}^n$.

$$x^0 = \bar{0}$$

$$e^0 = -g$$

$$d^0 = -e^0$$

$$k = 0$$

Se $\|e^0\| < \varepsilon$

Retornar $x = x^0$;

Repetir:

Se $(d^k)^T B d^k \leq 0$

Achar $\gamma \geq 0$ tal que $x = x^k + \gamma d^k$ satisfaz $\|x\| = \Delta$.

Retornar x ;

$$\alpha_k = \frac{(e^k)^T e^k}{(d^k)^T B d^k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$$

Se $\|x^{k+1}\| \geq \Delta$

Achar $\gamma \geq 0$ tal que $x = x^k + \gamma d^k$ satisfaz $\|x\| = \Delta$.

Retornar x ;

$$e^{k+1} = e^k + \alpha_k B d^k$$

Se $\|e^{k+1}\| < \varepsilon \|e^0\|$

Retornar x ;

$$\beta_{k+1} = \frac{(e^{k+1})^T e^{k+1}}{(e^k)^T e^k}$$

$$d^{k+1} = -e^{k+1} + \beta_{k+1} d^k$$

$$k = k + 1$$

Fim do repetir.

O algoritmo da aproximação de Steihaug difere do Algoritmo 3.8 pela presença de dois novos critérios de parada. A primeira instrução condicional **Se** termina o algoritmo quando a direção d^k é uma direção de curvatura nula ou negativa determinada pela matriz B . A segunda instrução condicional **Se** termina o algoritmo

quando o ponto x^{k+1} viola a região de confiança. Em ambos os casos, um ponto final x é encontrado onde a direção de busca corrente intercepta a fronteira da região de confiança.

Como no algoritmo o ponto inicial é $x^0 = \bar{0}$, supondo que $\|e^0\| \geq \varepsilon$ e $(d^0)^T B d^0 > 0$, temos que após a primeira iteração é obtido o ponto

$$x^1 = \alpha_0 d^0 = \frac{(e^0)^T e^0}{(d^0)^T B d^0} d^0 = - \frac{g^T g}{g^T B g} g = x_C$$

Assim, na primeira iteração os algoritmos de *dogleg* e Steihaug obtêm o mesmo ponto.

Observamos que em \mathbb{R}^2 os algoritmos de *dogleg* e Steihaug obtêm a mesma solução quando a hessiana da função quadrática é definida positiva.

Capítulo 4

Problemas com uma bola e uma variedade linear

Neste capítulo são discutidos três problemas relativos a uma variedade linear e a uma bola fechada. Os problemas (P1) e (P3), apresentados abaixo, aparecem comumente em estudos de problemas de programação não linear. Relacionado aos dois problemas há o problema (P2), um problema geométrico. O propósito deste capítulo é caracterizar as soluções de cada problema e estabelecer os vínculos existentes entre as soluções. A análise das relações entre os três problemas e suas soluções é a principal contribuição deste trabalho, sendo que alguns dos resultados apresentados são originais.

Um exemplo de problema que recai em (P1) é exibido na Seção 2.6.2, onde é feita uma proposta para a fase de viabilidade do método de restauração inexata proposto por Martínez e Pillota [14].

Um problema que recai em (P3) aparece na obtenção do passo normal do método de programação quadrática seqüencial, discutido na Seção 2.6.1. Associado a problema (P3) há o problema (P3I), abordado na Seção 4.4.2. Dois exemplos de problemas que recaem em (P3I) são uma estimativa do multiplicador de Lagrange do problema (E) para um ponto qualquer do espaço \mathbb{R}^n , abordado na Seção 2.6.1, e uma alternativa para a fase de viabilidade do método de restauração inexata, discutido na Seção 2.6.2. O problema dos quadrados mínimos discreto, abordado na Seção 3.2.1, também é semelhante ao problema (P3I).

4.1 Formulação dos problemas

Dados a matriz não nula $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ com $m < n$, o vetor $b \in \mathbb{R}^m$, o raio $\Delta > 0$, a variedade linear

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\} \quad (4.1)$$

e a bola fechada

$$\bar{B} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq \Delta\}, \quad (4.2)$$

consideramos os seguintes problemas:

$$\begin{array}{ll} \text{(P1)} & \min \quad \|x\| \\ & \text{s. a } x \in L \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{(P2)} & \min \quad d(y, L) \\ & \text{s. a } y \in \bar{B} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{(P3)} & \min \quad \|Az - b\| \\ & \text{s. a } z \in \bar{B} \end{array}$$

Nos problemas (P1) e (P2), supomos $L \neq \emptyset$.

O primeiro problema consiste em encontrar o ponto de menor norma euclidiana na variedade linear L . O segundo problema significa calcular a distância entre a variedade linear L e a bola fechada \bar{B} . O terceiro problema consiste em encontrar um ponto de norma limitada que minimiza a norma euclidiana da diferença $Az - b$.

Serão discutidas nas próximas seções as soluções de cada problema e as relações existentes entre as soluções.

4.2 Problema (P1)

Dada a variedade linear

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

definida em (4.1), desejamos estudar o problema

$$\begin{aligned}
 \text{(P1)} \quad & \min \quad \|x\| \\
 & \text{s. a } x \in L
 \end{aligned}$$

O objetivo do problema é encontrar um ponto de menor norma euclidiana de uma variedade linear. Como uma variedade linear é um conjunto fechado, há um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ que minimiza a norma. Esse problema também pode ser entendido como encontrar a projeção ortogonal da origem O em uma variedade linear. Conforme veremos adiante, a solução de (P1) é única quando a norma considerada é a euclidiana.

A mudança da norma na função objetivo do problema (P1) pode não mais garantir a unicidade da solução. Para a norma do máximo, definida como $\|x\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\}$ para $x \in \mathbb{R}^n$, existe um exemplo em que há infinitas soluções. Dados $A = [1 \ 0]$ e $b = 1$, a variedade linear definida em (4.1) é a reta

$$L = \{[1 \ \alpha]^T; \alpha \in \mathbb{R}\}.$$

Tomando os pontos $a = [1 \ -1]^T$ e $b = [1 \ 1]^T$, o intervalo fechado $[a, b]$ é o conjunto solução do problema

$$\begin{aligned}
 \min \quad & \|x\|_\infty \\
 \text{s. a } & x \in L
 \end{aligned}$$

ilustrado na Figura 4.1.

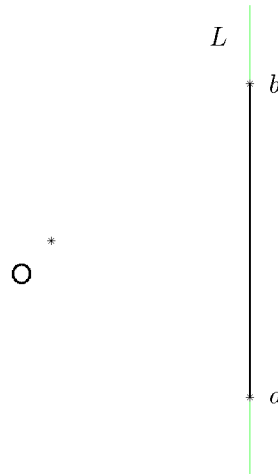


Figura 4.1: Problema (P1) usando a norma do máximo.

Veremos na seqüência a caracterização da solução, bem como um problema equivalente associado e a relação entre um certo hiperplano e a solução de (P1).

4.2.1 Caracterização da solução

O ponto da variedade linear L de menor norma euclidiana é único e pode ser caracterizado conforme os dois próximos lemas.

Lema 4.1 *Se o ponto x^* é um ponto de menor norma euclidiana da variedade linear L definida em (4.1), então ele é único e pertence ao conjunto $Im(A^T)$.*

Prova. O vetor x^* pode ser decomposto em dois vetores

$$x^* = \bar{x} + \tilde{x}$$

onde $\bar{x} \in Im(A^T)$ e $\tilde{x} \in \mathcal{N}(A)$. Uma vez que $\tilde{x} \in \mathcal{N}(A)$,

$$A\bar{x} = A(x^* - \tilde{x}) = b$$

Logo,

$$\bar{x} \in L.$$

Pela Proposição 1.2, $\bar{x}^T \tilde{x} = 0$. Assim,

$$\|x^*\|^2 = \|\bar{x}\|^2 + \|\tilde{x}\|^2.$$

Se $\tilde{x} \neq \bar{0}$, então

$$\|x^*\| > \|\bar{x}\|,$$

contradição com o ponto x^* ser um ponto de menor norma euclidiana da variedade linear L . Portanto, $\tilde{x} = \bar{0}$, e com isso, $x^* = \bar{x} \in Im(A^T)$.

Para mostrar a unicidade, sejam os pontos

$$x^*, \hat{x} \in L$$

soluções do problema (P1). Como $A(x^* - \hat{x}) = b - b = \bar{0}$,

$$x^* - \hat{x} \in \mathcal{N}(A).$$

Uma vez que $x^*, \hat{x} \in \text{Im}(A^T)$,

$$x^* - \hat{x} \in \text{Im}(A^T).$$

Logo,

$$x^* - \hat{x} = \bar{0}.$$

Portanto, as duas soluções são iguais. \square

Pela Proposição 1.9, existe um único ponto $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ comum aos conjuntos L e $\text{Im}(A^T)$, ou seja,

$$L \cap \text{Im}(A^T) = \{\bar{x}\}. \quad (4.3)$$

Usando tal fato, a unicidade e definição da solução do problema (P1) também pode ser comprovada conforme o lema abaixo.

Lema 4.2 *O ponto \bar{x} definido em (4.3) é a única solução do problema (P1).*

Prova. Seja um ponto $x \in L$ qualquer distinto do ponto \bar{x} . O vetor

$$v = x - \bar{x}$$

é não nulo e o ponto v pertence ao conjunto $\mathcal{N}(A)$. Pela Proposição 1.2,

$$v^T \bar{x} = 0,$$

pois $\bar{x} \in \text{Im}(A^T)$. Assim, como $x = v + \bar{x}$,

$$\|x\|^2 = \|v\|^2 + \|\bar{x}\|^2,$$

e disso,

$$\|x\| > \|\bar{x}\|.$$

\square

Tanto pelo Lema 4.1 como pelo Lema 4.2, a solução do problema (P1) é dada por $x^* \in L \cap \text{Im}(A^T)$. Assim, de acordo com (1.1) e (1.2), para qualquer vetor

$\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ que satisfaz

$$AA^T\lambda^* = b, \quad (4.4)$$

o ponto

$$x^* = A^T\lambda^* \quad (4.5)$$

é a solução do problema (P1). A Figura 4.2 exemplifica o problema e a solução.

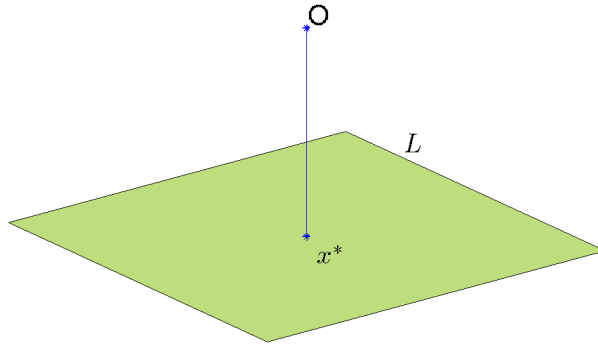


Figura 4.2: Problema (P1).

Vale observar que sempre existe um vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ que satisfaz 4.4 quando o conjunto L é não vazio. De fato, tomando um ponto $x \in L$, podemos decompô-lo em $x = \bar{x} + \tilde{x}$ com $\bar{x} \in \text{Im}(A^T)$ e $\tilde{x} \in \mathcal{N}(A)$. Como existe um vetor $w \in \mathbb{R}^m$ tal que $\bar{x} = A^T w$, e $A\tilde{x} = \bar{0}$, temos que $Ax = AA^T w + \bar{0}$. Portanto, há um vetor $\lambda^* = w$ tal que $b = AA^T\lambda^*$.

O lema seguinte apresenta uma relação de ortogonalidade entre o vetor x^* e a variedade linear L .

Lema 4.3 *Se o ponto x^* é a solução do problema (P1) então $(x^* - x)^T x^* = 0$ para qualquer ponto $x \in L$.*

Prova. Dado um ponto $x \in L$ qualquer,

$$A(x^* - x) = b - b = \bar{0},$$

logo $x^* - x \in \mathcal{N}(A)$. Pelo Lema 4.1, $x^* \in \text{Im}(A^T)$. Portanto, pela Proposição 1.2, $(x^* - x)^T x^* = 0$. \square

Segundo as Proposições 1.6 e 1.8, a variedade linear L dada em (4.1) é uma translação do subespaço vetorial $\mathcal{N}(A)$. De acordo com a Proposição 1.2 e com o Lema 4.3, se $x^* \in L$ é a solução do problema (P1), então o vetor x^* é ortogonal a $\mathcal{N}(A)$ e à variedade linear L . A Figura 4.3 ilustra o fato.

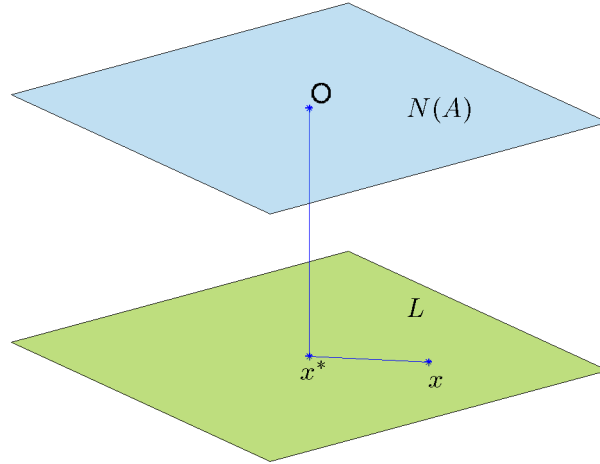


Figura 4.3: O vetor x^* é ortogonal à variedade linear L e a $\mathcal{N}(A)$.

4.2.2 Problema equivalente

O problema (P1) é equivalente ao abaixo:

$$\begin{aligned} \text{(Q1)} \quad & \min f_0(x) = \frac{1}{2}x^T x \\ & \text{s. a } Ax = b \end{aligned}$$

uma vez que $f_0(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2$. De acordo com o Lema 4.1, a solução de (Q1) é única.

Seja o ponto $x^* \in L$ a solução do problema (Q1). Quando a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é de posto completo e $m < n$, suas linhas são vetores linearmente independentes no espaço \mathbb{R}^n , e portanto qualquer ponto da variedade linear L definida em (4.1) é regular. Pelas condições de Karush-Kuhn-Tucker, existe um vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ de modo que $\nabla f_0(x^*) = A^T \lambda^*$. Ou seja,

$$x^* = A^T \lambda^*$$

para algum vetor $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$. Isso corresponde à relação expressa em (4.5). Dessa forma, quando a matriz A é de posto completo, as condições de Karush-Kuhn-Tucker

são válidas para a solução e correspondem ao Lema 4.1. Lembramos que pelo Lema 4.1, é válido (4.5) mesmo quando a matriz A não é de posto completo.

4.2.3 Hiperplano associado ao problema

A fim de permitir uma interpretação geométrica das relações entre o problema (P1) e os problemas (P2) e (P3), veremos a seguir a relação entre a variedade linear L , definida em (4.1), e um certo hiperplano contido no espaço \mathbb{R}^n . Supomos nesta seção que $b \neq \bar{0}$, pois assim $L \neq \mathcal{N}(A)$.

Seja o vetor $c \in \mathbb{R}^n$ dado por

$$c = A^T b. \quad (4.6)$$

Como o vetor b é não nulo, $c \neq \bar{0}$ pela Proposição 1.16.

O conjunto

$$P = \{x \in \mathbb{R}^n \mid c^T x = \|b\|^2\}$$

é um hiperplano que contém a variedade linear L definida em (4.1), conforme a Proposição 1.15.

De acordo com (1.11), o ponto

$$c^* = \frac{b^T b}{c^T c} c \quad (4.7)$$

é o ponto do hiperplano P de menor norma euclidiana.

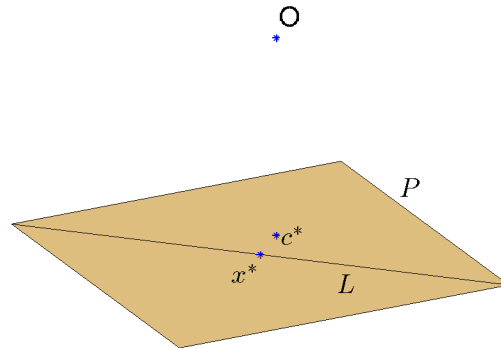


Figura 4.4: Hiperplano P associado ao problema (P1).

A Figura 4.4 apresenta uma variedade linear L e o hiperplano P que a contém, bem como a solução x^* do problema (P1) e o ponto c^* . Observamos que em geral os pontos x^* e c^* são distintos.

Veremos, nos próximos lemas, a situação em que o ponto c^* é a solução do problema (P1). Lembramos que as matrizes $A^T A$ e AA^T , por serem semidefinidas positivas, não possuem autovalores negativos. No entanto, podem possuir o autovalor nulo caso não sejam definidas positivas.

Lema 4.4 *Seja a variedade linear L definida em (4.1). Se*

- a) *o ponto $x^* \in L$ é a solução do problema (P1);*
- b) *o vetor c , definido em (4.6), é um autovetor da matriz $A^T A$ associado a um autovalor $\gamma > 0$;*

Então

- 1) $x^* = \frac{1}{\gamma} c$;
- 2) b é um autovetor da matriz AA^T associado ao autovalor γ ;
- 3) $c^* = x^*$, com c^* dado em (4.7).

Prova. Pela hipótese (a), conforme o Lema 4.1, (4.4) e (4.5),

$$x^* = A^T \lambda^* \tag{4.8}$$

e $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ um vetor tal que

$$AA^T \lambda^* = b.$$

Dessa forma,

$$A^T A(\gamma A^T \lambda^*) = \gamma A^T (AA^T \lambda^*) = \gamma A^T b = \gamma c.$$

Pela hipótese (b), como $A^T A c = \gamma c$,

$$A^T A(\gamma A^T \lambda^*) = A^T A c.$$

Assim,

$$\gamma A^T \lambda^* - c \in \mathcal{N}(A^T A) = \mathcal{N}(A).$$

Uma vez que $c = A^T b$,

$$\gamma A^T \lambda^* - c = A^T (\gamma \lambda^* - b) \in \text{Im}(A^T).$$

Daí, pela Proposição 1.2,

$$\gamma A^T \lambda^* - c = \bar{0}.$$

Logo, usando (4.8),

$$x^* = A^T \lambda^* = \frac{1}{\gamma} c, \quad (4.9)$$

o que prova (1).

De acordo com (4.6) e (4.9), $A^T b = c = \gamma x^*$. Daí, por (4.8),

$$AA^T b = \gamma A x^* = \gamma b, \quad (4.10)$$

demonstrando (2).

Por (4.6), (4.7) e (4.10),

$$c^* = \frac{b^T b}{b^T A A^T b} c = \frac{b^T b}{\gamma b^T b} c = x^*,$$

o que confirma (3). □

Lema 4.5 *Seja a variedade linear L definida em (4.1). Se*

- a) *b é um autovetor da matriz AA^T associado a um autovalor $\gamma > 0$;*
- b) *o ponto $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ é definido como $\hat{x} = \frac{1}{\gamma} c$, com o vetor $c = A^T b$ dado em (4.6);*

Então

- 1) *o ponto \hat{x} é a solução do problema (P1);*
- 2) *c é um autovetor da matriz $A^T A$ associado ao autovalor γ ;*
- 3) *$c^* = \hat{x}$, com c^* dado em (4.7).*

Prova. Pela hipótese (a),

$$AA^T b = \gamma b.$$

Tomando

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{\gamma} b, \quad (4.11)$$

o vetor é tal que

$$AA^T \hat{\lambda} = b.$$

Segundo a hipótese (b), por (4.4), (4.5), (4.11) e pelo Lema 4.2, o ponto

$$A^T \hat{\lambda} = \frac{1}{\gamma} A^T b$$

é a solução do problema (P1). Logo, por (4.6),

$$\hat{x} = \frac{1}{\gamma} c$$

é a solução de (P1), o que demonstra (1).

Uma vez que $AA^T b = \gamma b$, pela Proposição 1.3, $A^T A c = \gamma c$, confirmando (2).

Por (4.6), (4.7) e pela hipótese (a),

$$c^* = \frac{b^T b}{b^T A A^T b} c = \frac{b^T b}{\gamma b^T b} c = x^*,$$

o que prova (3). □

Os lemas 4.4 e 4.5 afirmam que o ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é a solução do problema (P1) e o vetor $c \in \mathbb{R}^n$ é tal que $A^T A c = \gamma c$ para um certo $\gamma > 0$ se, e somente se, $x^* = \frac{1}{\gamma} c$ e o vetor $b \in \mathbb{R}^m$ é tal que $AA^T b = \gamma b$. Quando isso ocorre, o ponto x^* , ponto de menor norma euclidiana da variedade linear $L \subset P$, coincide com o ponto c^* , ponto de menor norma euclidiana do hiperplano P . A Figura 4.5 exemplifica um caso onde os pontos c^* e x^* coincidem.

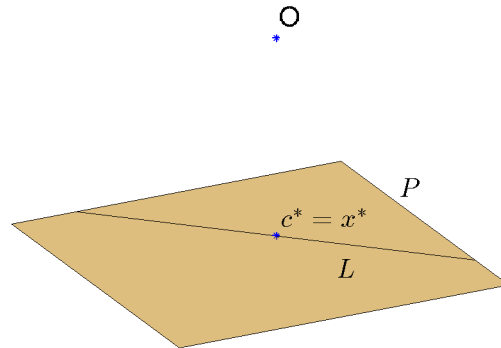


Figura 4.5: Exemplo em que os pontos c^* e x^* coincidem.

4.3 Problema (P2)

Sejam os dois conjuntos

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

$$\bar{B} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq \Delta\}$$

dados em (4.1) e (4.2), respectivamente. Consideramos o problema

$$\begin{aligned} \text{(P2)} \quad & \min \quad d(y, L) \\ & \text{s. a } y \in \bar{B} \end{aligned}$$

Apresentaremos as soluções do problema na Seção 4.3.2, logo após a análise que será feita a seguir.

4.3.1 Caracterização do problema

O problema (P2) significa encontrar o minimizador da distância entre um elemento da bola fechada \bar{B} e a variedade linear L , definidos respectivamente em (4.2) e (4.1). Veremos na Seção 4.3.2 que a solução do problema (P2) é obtida a partir da solução do problema (P1).

Nesta seção, analisaremos o caso em que a bola fechada \bar{B} e a variedade linear L são disjuntas, isto é, $\bar{B} \cap L = \emptyset$. Se o ponto $x^* \in L$ é a solução do problema (P1), então $\|x^*\| > \Delta$ e há um ponto y^* na fronteira da bola \bar{B} cujo vetor posição tem a mesma direção e sentido do vetor x^* . É o ponto

$$y^* = \frac{\Delta}{\|x^*\|} x^*. \quad (4.12)$$

O próximo lema exhibe a distância entre o ponto y^* e conjunto L . A Figura 4.6 ilustra a demonstração.

Lema 4.6 *Se $\bar{B} \cap L = \emptyset$, com os conjuntos L e \bar{B} definidos em (4.1) e (4.2), e o ponto x^* é a solução do problema (P1), então $d(y^*, L) = \|x^* - y^*\|$, sendo o ponto y^* definido em (4.12).*

Prova. Seja x um ponto qualquer do conjunto L diferente do ponto x^* . O vetor

$$v = x^* - x$$

é ortogonal ao vetor $y^* - x^*$, pois

$$v^T(y^* - x^*) = 0$$

de acordo com (4.12) e o Lema 4.3. Como

$$y^* - x = (y^* - x^*) + v,$$

temos

$$\|y^* - x\|^2 = \|y^* - x^*\|^2 + \|v\|^2.$$

Daí, como $v \neq \bar{0}$,

$$\|y^* - x\|^2 > \|y^* - x^*\|^2.$$

Logo, para qualquer ponto x do conjunto L diferente do ponto x^* ,

$$\|y^* - x\| > \|y^* - x^*\|.$$

Portanto, $d(y^*, L) = \|x^* - y^*\|$.

□

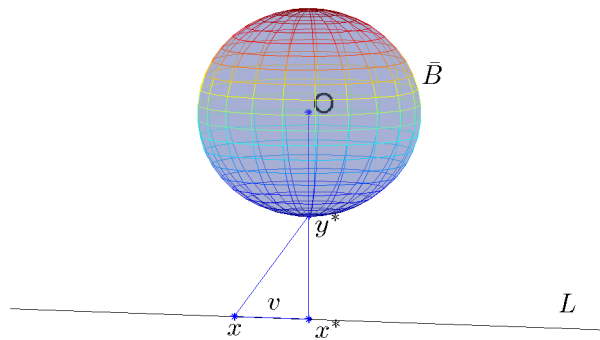


Figura 4.6: Lema 4.6.

Para auxiliar o desenvolvimento das próximas demonstrações, usaremos o hiperplano

$$H = \{h \in \mathbb{R}^n \mid h^T y^* = \Delta^2\}. \quad (4.13)$$

Observamos que, por (4.12), o ponto y^* pertence ao hiperplano e o vetor y^* é ortogonal a H , conforme mostra a Figura 4.7. Mostramos no próximo lema a distância

entre o hiperplano e a variedade linear L . A demonstração é mostrada na Figura 4.8.

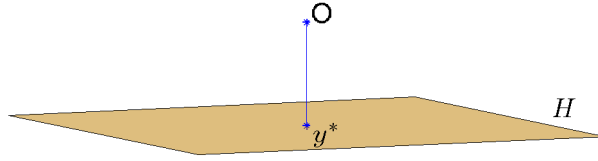


Figura 4.7: Hiperplano H .

Lema 4.7 *Seja o conjunto L definido em (4.1) e o ponto $x^* \in L$ a solução do problema (P1). Dados o ponto y^* em (4.12) e o hiperplano H em (4.13), temos que $d(H, L) = \|x^* - y^*\|$.*

Prova. Dados dois pontos $x \in L$ e $h \in H$ arbitrários, consideramos os vetores

$$v = x - x^* \quad \text{e} \quad u = h - y^*.$$

De acordo com o Lema 4.3, $v^T x^* = 0$. Pela construção do hiperplano H , $u^T y^* = 0$. Conforme (4.12), os vetores x^* e y^* são paralelos. Desse modo,

$$x - h = (v + x^*) - (u + y^*) = (v - u) + (x^* - y^*),$$

com $(v - u)^T (x^* - y^*) = 0$. Assim,

$$\|x - h\|^2 = \|v - u\|^2 + \|x^* - y^*\|^2.$$

Logo,

$$\|x - h\| \geq \|x^* - y^*\|.$$

Portanto, a menor distância entre um ponto do hiperplano H e um ponto da variedade linear L é $\|x^* - y^*\|$. \square

Na próxima seção será discutido como obter uma solução do problema (P2).

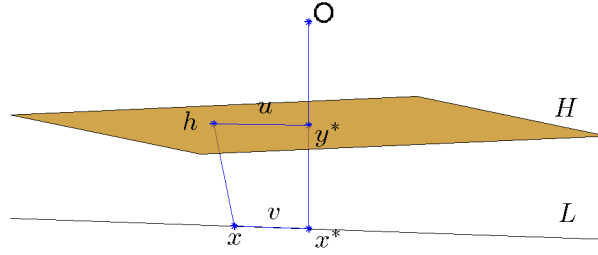


Figura 4.8: Lema 4.7.

4.3.2 Solução

As soluções do problema (P2) são dadas pelo Lema 4.8, segundo o qual há uma relação entre tais soluções e a do problema (P1). A partir da solução de (P1), é possível obter uma solução de (P2) e o valor mínimo da função objetivo. A Figura 4.9 ilustra a demonstração para o caso em que $\bar{B} \cap L = \emptyset$.

Lema 4.8 *Seja x^* a solução do problema (P1).*

- 1) *Se $\|x^*\| \leq \Delta$, então o ponto x^* é a solução de menor norma euclidiana do problema (P2), e a distância entre os conjuntos \bar{B} e L , definidos em (4.2) e (4.1), é nula.*
- 2) *Se $\|x^*\| > \Delta$, o ponto y^* definido em (4.12) é a única solução do problema (P2), e a distância entre \bar{B} e L é $\|x^*\| - \Delta$.*

Prova. A primeira situação significa $\bar{B} \cap L \neq \emptyset$. Nesse caso, qualquer elemento da interseção é uma solução do problema (P2), sendo o ponto $x^* \in \bar{B} \cap L$ o de menor norma euclidiana.

A segunda situação implica em $\bar{B} \cap L = \emptyset$, e é discutida a seguir. Dado um ponto $y \in \bar{B}$ com $y \neq y^*$, há um ponto $x \in L$ de modo que

$$d(y, L) = \|x - y\|, \quad (4.14)$$

pois a variedade linear L é um conjunto fechado.

Como os vetores y e y^* são diferentes, pela Proposição 1.1 temos que $y^T y^* < \Delta^2$. O vetor $v = x - x^*$ é tal que $v^T x^* = 0$ de acordo com o Lema 4.3. Assim, $x^T y^* = (x^* + v)^T y^* = \Delta \|x^*\| + 0 > \Delta^2$. Desse modo,

$$x^T y^* > \Delta^2 > y^T y^*.$$

Isto é, os pontos x e y encontram-se em semi-espacos abertos distintos em relação ao hiperplano H . Pela Proposição 1.12, há um vetor $h \in H$ e um escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ com $0 < \alpha < 1$ tais que

$$h = y + \alpha(x - y).$$

Como

$$(1 - \alpha) \|(x - y)\| = \|x - (y + \alpha(x - y))\| = \|x - h\|,$$

uma vez que $x \in L$ e $h \in H$, pelo Lema 4.7 temos que $\|x - h\| \geq \|x^* - y^*\|$, ou seja,

$$(1 - \alpha) \|(x - y)\| \geq \|x^* - y^*\|.$$

Daí,

$$\|(x - y)\| \geq \frac{1}{(1 - \alpha)} \|x^* - y^*\| > \|x^* - y^*\|$$

pois $0 < \alpha < 1$. Logo, por (4.14),

$$d(y, L) > \|x^* - y^*\|,$$

Pelo Lema 4.6, $d(y^*, L) = \|x^* - y^*\| = \|x^*\| - \Delta$. Portanto, para um ponto $y \in \bar{B}$ diferente de y^* ,

$$d(y, L) > d(y^*, L) = \|x^*\| - \Delta.$$

□

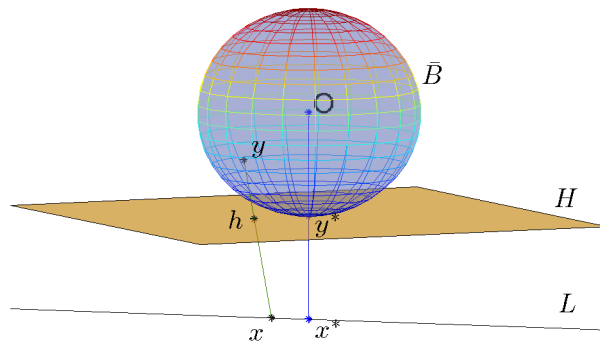


Figura 4.9: Lema 4.8 quando $\bar{B} \cap L = \emptyset$.

A Figura 4.10 ilustra o problema (P2) quando os conjuntos L e \bar{B} são disjuntos. Os pontos x^* e y^* são as respectivas soluções dos problemas (P1) e (P2).

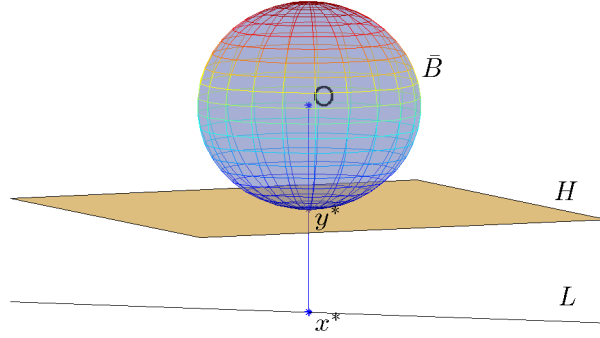


Figura 4.10: Solução do problema (P2).

4.4 Problema (P3)

Dada a bola fechada

$$\bar{B} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq \Delta\}$$

definida em (4.2), a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ com $m < n$, e o vetor $b \in \mathbb{R}^m$, consideramos o seguinte problema:

$$\begin{aligned} \text{(P3)} \quad & \min \quad \|Az - b\| \\ & \text{s. a } z \in \bar{B} \end{aligned}$$

A função $e : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ dada por $e(z) = Az - b$ é muitas vezes chamada de resíduo linear. Assim, o problema (P3) consiste em minimizar a norma euclidiana de um certo resíduo linear que possui uma restrição de bola fechada em seu domínio.

O estudo do problema será feito a partir de um problema equivalente. Associado ao problema (P3) há o problema irrestrito (P3I), discutido na Seção 4.4.2. Veremos como caracterizar as soluções dos problemas (P3) e (P3I).

4.4.1 Problema equivalente

Sejam as funções $q, \Theta : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dadas por

$$q(z) = \frac{1}{2} \|Az - b\|^2 = \frac{1}{2} z^T A^T A z - b^T A z + \frac{1}{2} b^T b,$$

$$\Theta(z) = \frac{1}{2} (z^T z - \Delta^2).$$

Minimizar a função q corresponde a minimizar, em z , a função $\|Az - b\|$. E $\Theta(z) \leq 0$ se, e somente se, $\|z\| \leq \Delta$. Com isso, o problema (P3) equivale ao seguinte:

$$\begin{aligned} \text{(Q3)} \quad & \min \quad q(z) \\ & \text{s. a} \quad \Theta(z) \leq 0 \end{aligned}$$

Em outras palavras, resolver o problema (P3) equivale a resolver o problema de minimizar uma função quadrática de hessiana $A^T A$ semidefinida positiva com restrição de bola fechada centrada na origem. Os problemas quadráticos em uma bola foram discutidos na Seção 3.3.

4.4.2 Problemas irrestritos associados

Associados aos problemas (P3) e (Q3) há os problemas irrestritos:

$$\begin{aligned} \text{(P3I)} \quad & \min \quad \|Az - b\| \\ & \text{s. a} \quad z \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(Q3I)} \quad & \min \quad q(z) = \frac{1}{2} \|Az - b\|^2 \\ & \text{s. a} \quad z \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

A caracterização das soluções do problema (Q3), equivalente ao (P3), é feita a partir do estudo dos problemas irrestritos (P3I) e (Q3I). Veremos também uma interpretação alternativa do problema (P3I).

Seja o conjunto

$$G = \{x \in \mathbb{R}^n \mid A^T A x = A^T b\}. \quad (4.15)$$

Segundo o próximo lema, ele possui os minimizadores globais da função q .

Lema 4.9 *O conjunto G , definido em (4.15), é não vazio e é o conjunto dos minimizadores globais da função objetivo q do problema (Q3).*

Prova. O gradiente da função q é $\nabla q(z) = A^T Az - c$. Um vetor $z \in \mathbb{R}^n$ satisfaz $\nabla q(z) = \bar{0}$ se, e somente se, $z \in G$. De acordo com a Proposição 1.13, o conjunto G não é vazio. Como a matriz $A^T A$ é a hessiana da função q e é semidefinida positiva, pelo Lema 3.1 temos que G possui os minimizadores globais de q . \square

Pelo lema acima, a variedade linear G é o conjunto solução do problema (Q3I). Como (Q3I) e (P3I) são problemas equivalentes, G é o conjunto solução de (P3I). Mais ainda, o lema garante sempre haver uma solução para ambos os problemas.

Como um vetor $z \in \mathbb{R}^n$ satisfaz $q(z) = 0$ quando, e somente quando, $z \in L$, se $L \neq \emptyset$, então L é o conjunto solução do problema (Q3) segundo a Proposição 1.14 e, portanto, o valor mínimo da função q é zero.

O problema (P3I) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \text{(P3D)} \quad & \min \quad d(u, b) = \|u - b\| \\ & \text{s. a } u \in \text{Im}(A) \subset \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

Ou seja, trata-se de procurar um ponto da imagem da matriz A de menor distância euclidiana do ponto $b \in \mathbb{R}^m$.

Dado um ponto $z \in G$, os pontos $u^* = Az$ e $w^* = u^* - b \in \mathbb{R}^m$ são tais que

$$u^* \in \text{Im}(A), \quad (-w^*) \in \mathcal{N}(A^T) \quad \text{e} \quad b = u^* + (-w^*).$$

Como $\text{Im}(A)^\perp = \mathcal{N}(A^T)$ segundo a Proposição 1.2, os vetores u^* e $(-w^*)$ são únicos, sendo o ponto u^* a projeção ortogonal do ponto b no subespaço vetorial $\text{Im}(A)$ e $\|w^*\|$ a menor distância entre o ponto b e um ponto da imagem da matriz A , conforme mostra a Figura 4.11.

Se $L \neq \emptyset$, pelas Proposições 1.13 e 1.14 a variedade linear L é o conjunto solução dos problemas (P3I) e (Q3I), pois $L = G$. Nesse caso, $b \in \text{Im}(A)$, e portanto a solução do problema (P3D) é $u^* = b$.

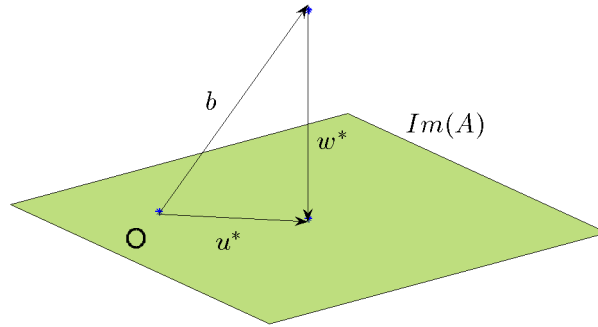


Figura 4.11: Problema (P3D).

4.4.3 Caracterização das soluções

As soluções do problema (P3) serão caracterizadas a partir do estudo do problema (Q3), pois os dois problemas são equivalentes.

Todos os pontos viáveis do problema (Q3) são regulares, porque $\nabla\Theta(z) \neq \bar{0}$ para os pontos $z \in \bar{B}$ tais que $\Theta(z) = 0$.

Pelas condições de Karush-Kuhn-Tucker para problemas com restrições de desigualdade, se z^* é uma solução do problema (Q3), então existe um escalar $\mu^* \in \mathbb{R}$ de modo que:

$$\nabla q(z^*) + \mu^* \nabla \Theta(z^*) = \bar{0} \quad (4.16)$$

$$\mu^* \Theta(z^*) = 0 \quad (4.17)$$

$$\mu^* \geq 0 \quad (4.18)$$

De acordo com o Lema 4.9, a variedade linear G , definida em (4.15), é o conjunto dos minimizadores globais da função q . Se o conjunto $X^* = \bar{B} \cap G$ é não vazio, então ele é o conjunto solução do problema (Q3), e portanto do problema (P3).

Os lemas abaixo caracterizam as soluções do problema (Q3) quando a bola fechada \bar{B} e a variedade linear G são conjuntos disjuntos.

Lema 4.10 *Sejam os conjuntos \bar{B} e G definidos em (4.2) e (4.15). Se $\bar{B} \cap G = \emptyset$ e $z^* \in \bar{B}$ é uma solução do problema (Q3), então $\|z^*\| = \Delta$ e há um escalar real $\mu^* > 0$ tal que $(A^T A + \mu^* I)z^* = A^T b$.*

Prova. Pelas condições de Karush-Kuhn-Tucker, se z^* é uma solução de (Q3), então

existe um escalar $\mu^* \in \mathbb{R}$ tal que (4.16), (4.17) e (4.18) são satisfeitos. Quando os conjuntos \bar{B} e G são disjuntos, se $z \in \bar{B}$ então $\nabla q(z) \neq \bar{0}$, pois $z \notin G$. Por (4.16) e (4.18), necessariamente

$$\mu^* > 0 \quad \text{e} \quad \nabla \Theta(z^*) \neq \bar{0}.$$

Por (4.17), temos que $\Theta(z^*) = 0$. Logo,

$$\|z^*\| = \Delta.$$

Novamente por (4.16),

$$(A^T A + \mu^* I)z^* = A^T b.$$

□

De acordo com o lema anterior, se $\bar{B} \cap G = \emptyset$ e um ponto $z^* \in \bar{B}$ é uma solução do problema (Q3), então ele deve satisfazer, para algum escalar $\mu^* \in \mathbb{R}$:

$$(A^T A + \mu^* I)z^* = A^T b; \tag{4.19}$$

$$\Theta(z^*) = 0; \tag{4.20}$$

$$\mu^* > 0. \tag{4.21}$$

No próximo lema veremos que as condições acima são suficientes para um ponto da bola fechada \bar{B} ser uma solução do problema (Q3). Mais ainda, elas garantem a unicidade da solução.

Lema 4.11 *Se um ponto $z^* \in \mathbb{R}^n$ é tal que $\|z^*\| = \Delta$ e $(A^T A + \mu^* I)z^* = A^T b$ para um certo escalar $\mu^* > 0$, então z^* é a única solução do problema (Q3).*

Prova. Tomamos $B = A^T A$ e $g = -A^T b$. Conforme a Proposição 1.4, matriz $B + \mu^* I$ é definida positiva. De acordo com o Lema 3.9, o ponto $z^* \in \bar{B}$ é a única solução do problema (Q3). □

Conforme os dois lemas acima, a solução z^* do problema (Q3) encontra-se na fronteira da bola quando $\bar{B} \cap G = \emptyset$. Ela também pertence à imagem da matriz

A^T , pois a relação (4.19) pode ser escrita como

$$z^* = A^T \frac{1}{\mu^*} (b - Az^*).$$

Quando o conjunto

$$L = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\},$$

dado em (4.1), é não vazio, pela Proposição 1.14 as variedades lineares L e G são iguais, e todas as discussões que envolvem o conjunto G valem para o conjunto L . Nesse caso, o vetor posição da solução é ortogonal à variedade linear L .

A Figura 4.12 mostra a interseção entre o subespaço vetorial $Im(A^T)$, ortogonal à variedade linear L , e a fronteira da bola fechada \bar{B} num caso em que os conjuntos L e \bar{B} são disjuntos, bem como a solução z^* do problema (P3). Lembramos que a solução pertence à interseção.

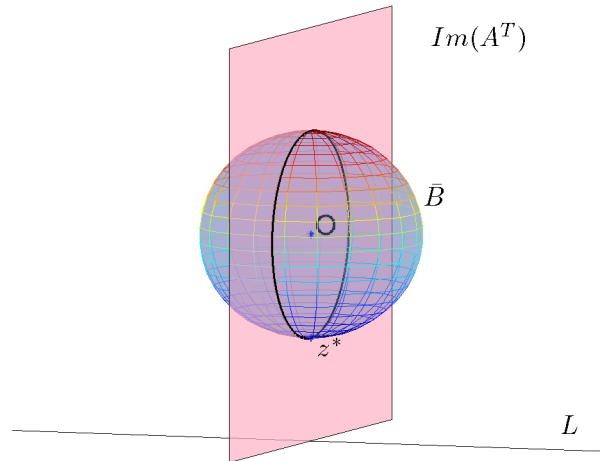


Figura 4.12: Solução do problema (P3).

4.5 Relações entre as soluções dos três problemas

Discutiremos nesta seção as relações entre as soluções dos problemas (P1), (P2) e (P3). Na Seção 4.5.1 veremos a interpretação geométrica das relações, e na Seção 4.5.2 mostraremos dois exemplos. Os resultados apresentados nesta seção

sintetizam a contribuição original deste trabalho.

No caso em que o conjunto L , definido em (4.1), é vazio, os problemas (P1) e (P2) não têm sentido. Quando $L \neq \emptyset$ e o conjunto $X^* = \bar{B} \cap L$ não é vazio, sendo a bola fechada \bar{B} definida em (4.2), qualquer elemento de X^* é uma solução dos problemas (P2) e (P3), e a solução do problema (P1) fornece a solução de (P2) e (P3) de menor norma euclidiana.

Em particular, quando $b = \bar{0}$, temos que $L = \mathcal{N}(A)$ e a solução do problema (P1) é o ponto O . O conjunto solução dos problemas (P2) e (P3) é $X^* = \mathcal{N}(A) \cap \bar{B}$.

No caso em que $L \neq \emptyset$ e $\bar{B} \cap L = \emptyset$, os problemas (P1), (P2) e (P3) possuem uma única solução. De acordo com o Lema 4.8, se o ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ é a solução do problema (P1), então o ponto $y^* = \frac{\Delta}{\|x^*\|}x^*$, dado em (4.12), é a solução do problema (P2).

Há uma situação em que a solução dos problemas (P2) e (P3) é a mesma quando $L \neq \emptyset$ e $\bar{B} \cap L = \emptyset$, conforme mostram os lemas abaixo. Observamos que, nesse caso, o vetor $b \in \mathbb{R}^m$ não é nulo. Além disso, a matriz AA^T não possui autovalores negativos, e o problema (Q3) equivale ao (P3).

Lema 4.12 *Considere os conjuntos L e \bar{B} definidos em (4.1) e (4.2), $L \neq \emptyset$, $\bar{B} \cap L = \emptyset$ e o ponto $y^* \in \mathbb{R}^n$ a solução do problema (P2). Se y^* é a solução do problema (Q3), então o vetor $b \neq \bar{0}$ é um autovetor da matriz AA^T não paralelo ao seu núcleo.*

Prova. De acordo com (4.4), (4.5), (4.12) e o Lema 4.8, $y^* = \frac{\Delta}{\|x^*\|}x^*$, com $x^* = A^T\lambda^*$ e $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ um vetor tal que $AA^T\lambda^* = b$. Além disso, $\|x^*\| > \Delta$.

Por (4.19), (4.21) e pelo Lema 4.10, existe um escalar real $\mu^* > 0$ tal que

$$(A^TA + \mu^*I)y^* = A^Tb.$$

Assim,

$$\frac{\Delta}{\|x^*\|}A^Tb + \mu^*\frac{\Delta}{\|x^*\|}A^T\lambda^* = A^Tb.$$

Multiplicando à esquerda pela matriz $\frac{\|x^*\|}{\Delta}A$,

$$AA^Tb + \mu^*b = \frac{\|x^*\|}{\Delta}AA^Tb.$$

Daí,

$$AA^T b = \frac{\mu^* \Delta}{\|x^*\| - \Delta} b.$$

Portanto, o vetor b é um autovetor da matriz AA^T associado ao autovalor positivo

$$\gamma = \frac{\mu^* \Delta}{\|x^*\| - \Delta}.$$

□

Lema 4.13 *Sejam os conjuntos L e \bar{B} definidos em (4.1) e (4.2), $L \neq \emptyset$, $\bar{B} \cap L = \emptyset$ e o ponto $y^* \in \mathbb{R}^n$ a solução do problema (P2). Se o vetor $b \neq \bar{0}$ é um autovetor da matriz AA^T não paralelo ao seu núcleo, então y^* é a solução do problema (Q3) e o multiplicador de Lagrange associado a (Q3) é $\mu^* = \frac{\|A^T b\|}{\Delta} - \gamma$.*

Prova. Por hipótese, existe um escalar $\gamma > 0$ tal que

$$AA^T b = \gamma b.$$

Seja o ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$x^* = \frac{1}{\gamma} A^T b.$$

Pelo Lema 4.5, ele é a solução do problema (P1). Conforme (4.12) e o Lema 4.8,

$$y^* = \frac{\Delta}{\|A^T b\|} A^T b.$$

Para

$$\mu^* = \frac{\|A^T b\|}{\Delta} - \gamma,$$

o ponto $z^* = y^*$ e o escalar μ^* satisfazem (4.19), (4.20) e (4.21). Portanto, pelo Lema 4.11, o ponto y^* é a solução do problema (Q3), e daí μ^* é o multiplicador de Lagrange associado a (Q3). □

Os dois lemas acima afirmam que, quando $L \neq \emptyset$ e $\bar{B} \cap L = \emptyset$, a solução do problema (P2) é a solução do problema (Q3) se, e somente se, o vetor b é um autovetor associado a um autovalor não nulo da matriz AA^T .

É possível estabelecer a relação entre a solução do problema (P2) e a do problema (Q3) quando $L \neq \emptyset$ e $\bar{B} \cap L = \emptyset$, em termos do vetor $c = A^T b$, definido em (4.6), e da matriz $A^T A$. Sob tais condições, o vetor c é não nulo segundo a Proposição 1.16. Lembramos que a matriz $A^T A$ não possui autovalores negativos.

Lema 4.14 *Considere os conjuntos L e \bar{B} definidos em (4.1) e (4.2), $L \neq \emptyset$, $\bar{B} \cap L = \emptyset$ e o ponto $y^* \in \mathbb{R}^n$ a solução do problema (P2). Se y^* é a solução do problema (Q3), então o vetor c , definido em (4.6), é um autovetor da matriz $A^T A$ não paralelo ao seu núcleo.*

Prova. Pelo Lema 4.12, há um escalar real $\gamma > 0$ tal que $AA^T b = \gamma b$. Pela Proposição 1.3, $A^T A c = \gamma c$. \square

Lema 4.15 *Sejam os conjuntos L e \bar{B} definidos em (4.1) e (4.2), $L \neq \emptyset$, $\bar{B} \cap L = \emptyset$ e o ponto $y^* \in \mathbb{R}^n$ a solução do problema (P2). Se o vetor c , definido em (4.6), é um autovetor da matriz $A^T A$ não paralelo ao seu núcleo, então y^* é a solução do problema (Q3).*

Prova. Por hipótese, $A^T A c = \gamma c$ para um certo escalar real $\gamma > 0$. Seja x^* a solução do problema (P1). Pelo Lema 4.4,

$$x^* = \frac{1}{\gamma} c \quad \text{e} \quad AA^T b = \gamma b.$$

Segundo o Lema 4.8, o ponto

$$y^* = \frac{\Delta}{\|x^*\|} x^* = \frac{\Delta}{\|c\|} c$$

é a solução do problema (P2). Pelo Lema 4.13, o ponto y^* é a solução do problema (Q3). \square

Os dois lemas acima afirmam que, quando $L \neq \emptyset$ e $\bar{B} \cap L = \emptyset$, a solução do problema (P2) é a solução do problema (Q3) se, e somente se, o vetor $c = A^T b$ é um autovetor associado a um autovalor não nulo da matriz $A^T A$.

A Tabela 4.1 sintetiza os resultados para o caso em que a variedade linear L intercepta a bola fechada \bar{B} , observando que $x^* \in L \cap \bar{B}$. A Tabela 4.2 faz o mesmo

para a situação em que os dois conjuntos são disjuntos. Lembramos que no último caso, $x^*, y^*, z^* \in \text{Im}(A^T)$ e $\|x^*\| > \|y^*\| = \|z^*\| = \Delta$.

Problema	Conjunto solução
(P1)	$L \cap \text{Im}(A^T) = \{x^*\}$
(P2)	$L \cap \bar{B}$
(P3)	$L \cap \bar{B}$

Tabela 4.1: Conjunto solução quando $L \cap \bar{B} \neq \emptyset$.

Problema	Solução
(P1)	$x^* \in L \cap \text{Im}(A^T)$
(P2)	$y^* = \frac{\Delta}{\ x^*\ } x^*$
(P3)	$z^* \in \bar{B}$ que satisfaz: $\exists \mu^* > 0 \mid (A^T A + \mu^* I) z^* = A^T b;$ $\ z^*\ = \Delta.$

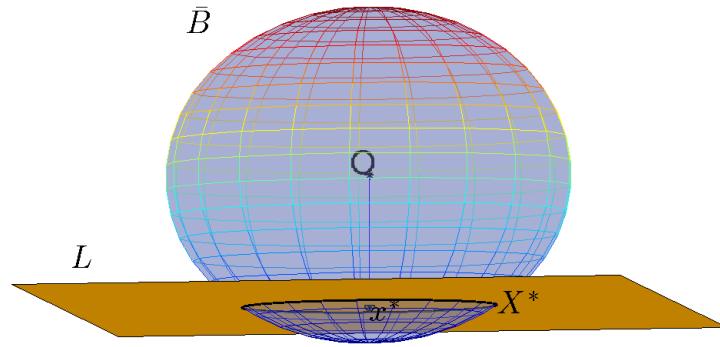
Tabela 4.2: Solução quando $L \cap \bar{B} = \emptyset$.

4.5.1 Interpretação geométrica

Nesta seção será feita a interpretação geométrica da relação entre as soluções dos três problemas. Suporemos a variedade L definida em (4.1) não vazia.

O problema (P1) possui somente uma solução, e ela é o único ponto da interseção da variedade linear L com o subespaço vetorial $\text{Im}(A^T)$ de acordo com os Lemas 4.1 e 4.2.

Quando a bola fechada \bar{B} definida em (4.2) intercepta a variedade linear L , a norma euclidiana da solução do problema (P1) é menor ou igual a Δ . O conjunto $X^* = \bar{B} \cap L$ é o conjunto solução dos problemas (P2) e (P3), sendo a solução do problema (P1) a solução de menor norma euclidiana dos problemas (P2) e (P3), conforme mostra a Figura 4.13.


 Figura 4.13: Conjunto solução X^* dos problemas (P2) e (P3) quando $\bar{B} \cap L \neq \emptyset$.

De acordo com o Lema 4.8, quando os conjuntos \bar{B} e L são disjuntos, a solução do problema (P2) é dada a partir da solução do problema (P1). Nesse caso, a solução do problema (P2) encontra-se na fronteira da bola fechada, pertence à imagem da matriz A , e os vetores posição das duas soluções são paralelos. Segundo o Lema 4.3, os vetores posição são ortogonais à variedade linear L .

Quando os conjuntos \bar{B} e L são disjuntos, o problema (P3) possui uma única solução, que se encontra na fronteira da bola e pertence ao conjunto $Im(A^T)$ segundo os Lemas 4.10 e 4.11. Pelos Lemas 4.14 e 4.15, a solução dos problema (P2) e (P3) é a mesma se, e somente se, o vetor $c = A^T b$ é um autovetor da matriz $A^T A$ associado a um autovalor $\gamma > 0$. Nesse caso, pelos Lemas 4.4 e 4.5, a solução do problema (P1) é $\frac{1}{\gamma} c$. Esse ponto é o de menor norma euclidiana do hiperplano P ortogonal ao vetor c e que contém a variedade linear L , de acordo com (1.11) e as Proposições 1.11 e 1.15. Pelo Lema 4.8, a solução do problema (P2) é $\frac{\Delta}{\|c\|} c$.

Problema	Solução
(P1)	$x^* = c^* = \frac{1}{\gamma} c$
(P2)	$y^* = \frac{\Delta}{\ c\ } c$
(P3)	$z^* = \frac{\Delta}{\ c\ } c$

 Tabela 4.3: Solução quando $L \cap \bar{B} = \emptyset$ e $A^T A c = \gamma c$, $\gamma > 0$.

Os fatos acima estão resumidos na Tabela 4.3 e são apresentados na Figura 4.14. Vale ressaltar que quando eles ocorrem, pelos Lemas 4.4, 4.5, 4.12 e 4.13, o vetor b é um autovetor da matriz AA^T associado ao autovalor γ , e o multiplicador de Lagrange associado ao problema (Q3) é $\mu^* = \frac{\|c\|}{\Delta} - \gamma$. O ponto $c^* = \frac{1}{\gamma}c$ é o ponto do hiperplano P de menor norma euclidiana.

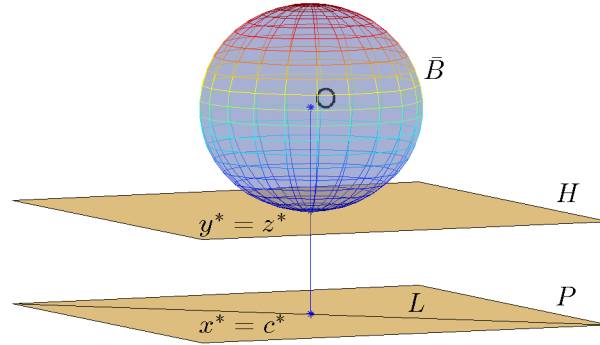


Figura 4.14: Problemas (P1), (P2) e (P3) quando $\bar{B} \cap L = \emptyset$ e $A^T A c = \gamma c$, $\gamma > 0$.

Na Seção 4.4.2 foi discutido o problema (P3I), que é o problema (P3) sem restrições. Conforme visto, o problema (P3I) pode ser interpretado como sendo o problema (P3D), procurar um ponto do conjunto $Im(A) \subset \mathbb{R}^m$ de menor distância euclidiana do ponto $b \in \mathbb{R}^m$. A solução do problema (P3D) é única e é a projeção ortogonal do vetor b em $Im(A)$, representada pelo vetor u^* na Figura 4.15.

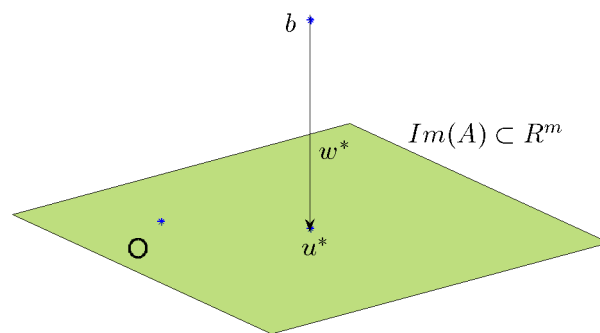


Figura 4.15: Problema (P3D).

4.5.2 Exemplos

Conforme visto acima, supondo não ser vazio o conjunto L dado em (4.1), os vetores posição das soluções dos problemas (P1) e (P2) são sempre paralelos quando $\bar{B} \cap L = \emptyset$, com a bola fechada \bar{B} definida em (4.2). E há uma situação em que a solução do problema (P2) e a do (P3) são iguais.

Apresentamos a seguir um exemplo em que a solução do problema (P2) e do (P3) diferem e um exemplo em que elas coincidem.

Primeiro exemplo

Dados

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 12 \\ 12 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Delta = 2$$

temos que a variedade linear associada aos três problemas é a reta

$$L = \{[3 \ 4 \ \alpha]^T; \alpha \in \mathbb{R}\}.$$

O hiperplano associado é o plano

$$P = \{[6 - 3\beta \ 4\beta \ \sigma]^T; \beta, \sigma \in \mathbb{R}\}.$$

O subespaço vetorial $Im(A^T)$ é o plano

$$Im(A^T) = \{[\nu \ \omega \ 0]^T; \nu, \omega \in \mathbb{R}\}.$$

A bola fechada é

$$\bar{B} = \{x \in \mathbb{R}^3 \mid \|x\| \leq 2\}.$$

A solução do problema (P1) é o ponto $x^* = [3 \ 4 \ 0]^T$, a do problema (P2) é $y^* = [1, 2 \ 1, 6 \ 0]^T$ e a do (P3), $z^* = [1, 449278 \ 1, 378257 \ 0]^T$. O multiplicador de Lagrange associado a (P3) é $\mu = 17, 119940$. O ponto $c^* = [3, 84 \ 2, 88 \ 0]$ é o ponto do plano P de menor norma euclidiana. Os pontos x^* , y^* , z^* e c^* pertencem ao plano $Im(A^T)$, sendo que os pontos y^* e z^* estão na fronteira da bola \bar{B} , pois $\|y^*\| = \|z^*\| = 2$.

A partir dos dados, obtemos

$$AA^T = \begin{bmatrix} 16 & 0 \\ 0 & 9 \end{bmatrix}, \quad A^T A = \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad c = A^T b = \begin{bmatrix} 48 \\ 36 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Observamos primeiramente que o vetor b não é um autovetor da matriz AA^T e o vetor c não é um autovetor da matriz $A^T A$, motivo pelo qual $x^* \neq c^*$ e $y^* \neq z^*$.

Também vemos que $\|x^*\| = 5$, $\|c^*\| = 4,8$, $\|Ay^* - b\| = 10,182338$ e $\|Az^* - b\| = 10,016868$, confirmando que a solução do problema (P1) não é o ponto do plano P de menor norma euclidiana, e que a solução do problema (P2) não é a solução do problema (P3).

A Figura 4.16 apresenta o primeiro exemplo em \mathbb{R}^3 . A Figura 4.17 destaca os pontos x^* , c^* , y^* e z^* no plano $\text{Im}(A^T)$, além da interseção com o plano P . Como a reta L é ortogonal ao plano $\text{Im}(A^T)$, ela é representada pelo ponto x^* , sua interseção com o plano. Verificamos que o vetor z^* não é paralelo ao vetor x^* nem ao vetor c^* . Já o vetor y^* é paralelo a vetor x^* .

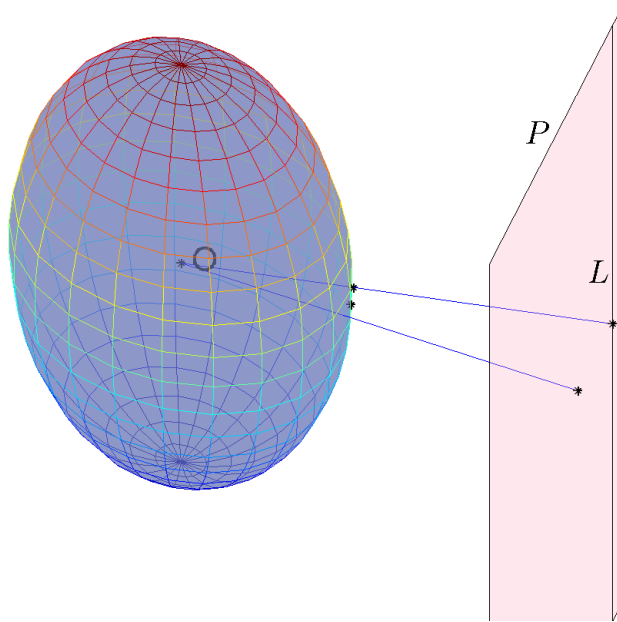
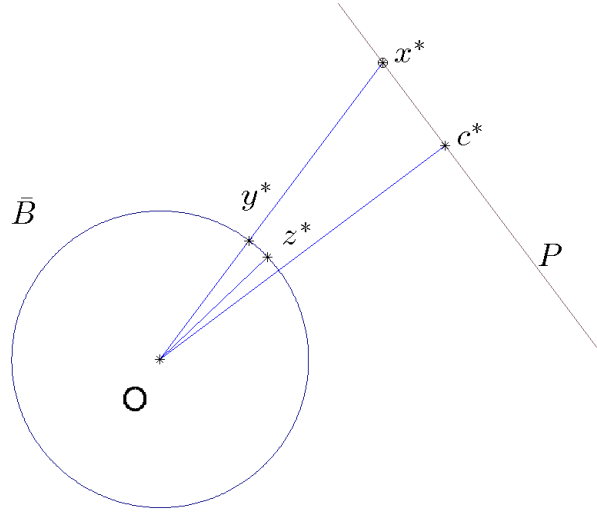


Figura 4.16: Primeiro exemplo em \mathbb{R}^3 .

Figura 4.17: Primeiro exemplo em $Im(A^T)$.**Segundo exemplo**

Ao mudarmos o vetor b no primeiro exemplo para

$$b = [16 \ 0]^T,$$

temos agora que a variedade linear é a reta

$$L = \{[4 \ 0 \ \alpha]^T; \alpha \in \mathbb{R}\}$$

e o hiperplano associado é o plano

$$P = \{[4 \ \beta \ \sigma]^T; \beta, \sigma \in \mathbb{R}\}.$$

A solução do problema (P1) é o ponto de menor norma euclidiana do plano P , $x^* = c^* = [4 \ 0 \ 0]^T$. A solução dos problemas (P2) e (P3) é $y^* = z^* = [2 \ 0 \ 0]^T$. O multiplicador de Lagrange associado a (P3) é $\mu = 16$.

Observamos que o vetor b é um autovetor da matriz AA^T associado ao autovalor $\gamma = 16$, mesmo autovalor associado ao autovetor $c = A^T b = [64 \ 0 \ 0]^T$ da matriz $A^T A$. Por isso $y^* = z^*$ e $x^* = c^* = \frac{1}{\gamma} c$.

A Figura 4.18 apresenta o segundo exemplo em \mathbb{R}^3 . A Figura 4.19 destaca

as soluções dos três problemas no plano $Im(A^T)$, além da interseção com o plano P . Como a reta L é ortogonal ao plano $Im(A^T)$, ela é representada pelo ponto x^* , sua interseção com o plano. A posição dos eixos do sistema de coordenadas nas Figuras 4.16 e 4.18 é a mesma. A observação vale também para as Figuras 4.17 e 4.19.

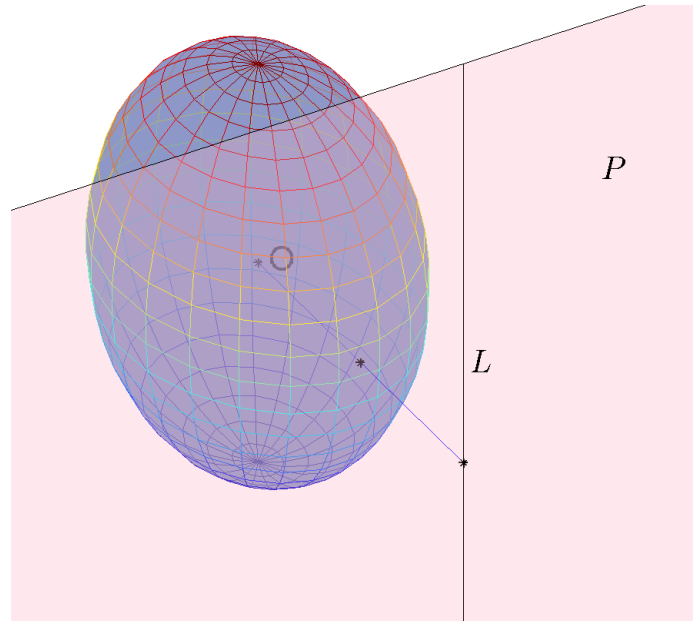


Figura 4.18: Segundo exemplo em \mathbb{R}^3 .

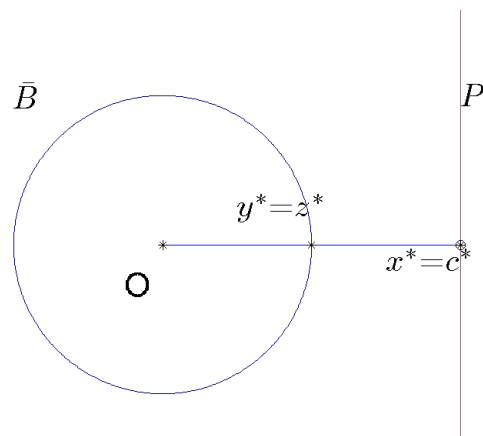


Figura 4.19: Segundo exemplo em $Im(A^T)$.

Conclusões

Neste trabalho, fizemos uma revisão de conceitos de álgebra linear, com uma ênfase em variedades lineares. Também tratamos de alguns tópicos principais sobre problemas de programação não linear e suas soluções, além de uma visão geral de algoritmos matemáticos iterativos. Comentamos que há vários algoritmos para resolver problemas de programação não linear, e apresentamos alguns deles. Por último, discutimos três problemas relativos a uma variedade linear e a uma bola euclidiana. As relações entre as soluções dos três problemas constituem na principal contribuição deste trabalho. A Seção 4.5 sintetiza os resultados originais.

Para a resolução de problemas irrestritos, exibimos os métodos de região de confiança. Neles, a função objetivo do problema é modelada por uma função quadrática, e é estabelecida uma região em que se confia no modelo. Através de uma avaliação da redução do valor da função objetivo em relação à redução predita pelo modelo, a região de confiança é mantida, aumentada ou diminuída. O subproblema a ser resolvido a cada iteração é a minimização de uma função quadrática sujeita a uma restrição de bola fechada. A resolução do subproblema é discutida na parte de problemas quadráticos.

Para problemas com restrições de igualdade, apresentamos dois métodos de resolução: um de programação quadrática seqüencial e um de restauração inexata.

No método de programação quadrática seqüencial abordado, motivados pelas condições necessárias de otimalidade de Karush-Kuhn-Tucker, adotamos como meta minimizar de algum modo a função lagrangeano sujeita às restrições do problema original, de modo a obter um ponto que satisfaça as condições de otimalidade. Para isso, modelamos a função lagrangeano por uma função quadrática, e as restrições, por uma função linear, isto é, por uma transformação afim. Adotamos uma estratégia de região de confiança e estabelecemos uma maneira de estimar o multiplicador de Lagrange a cada iteração.

O método de restauração inexata apresentado foi o proposto por Martínez [13] e Martínez e Pilotta [14], em sua versão para problemas com restrições de igualdade. A partir da constatação de que a obtenção do passo na programação quadrática seqüencial ocorre em duas fases, uma de viabilidade seguida de uma de otimalidade, o método de restauração inexata propõe uma flexibilização dessas fases. A primeira fase pode ser executada por qualquer técnica, desde que atenda alguns critérios para a convergência global do algoritmo; nenhuma região de confiança é exposta. Na segunda, é adotada uma estratégia de região de confiança em torno do ponto obtido na fase anterior da iteração corrente – diferentemente da programação quadrática seqüencial, em que o centro é o ponto obtido na iteração anterior. Conforme discutimos, há várias possibilidades para a execução da fase de viabilidade, dentre elas a minimização da medida de inviabilidade, a projeção ortogonal do ponto corrente em uma linearização das restrições e a redução da norma euclidiana de um modelo linear das restrições.

Os problemas quadráticos estão presentes em vários métodos de programação não linear, dentre eles os três abordados neste trabalho para resolver problemas mais gerais. Os problemas quadráticos mais comuns são os irrestritos e os com restrição de bola fechada. Apresentamos alguns métodos voltados à resolução desses problemas. Para os irrestritos, abordamos o do gradiente conjugado. Para os com restrição de bola fechada, há os métodos de *dogleg* e a aproximação de Steihaug, que oferecem uma solução aproximada. Observamos que a aproximação de Steihaug é uma modificação do método do gradiente conjugado, em que são acrescentados dois critérios de parada para contemplar a restrição de bola e permitir a ocorrência de direções nas quais o gráfico da função quadrática possui curvatura não positiva.

Ao longo da discussão dos métodos de resolução de problemas de programação não linear, surgiram dois problemas considerados importantes do ponto de vista teórico. São os problemas (P1) e (P3) apresentados no Capítulo 4. Associados a eles há o problema (P2). São problemas que envolvem uma variedade linear e uma bola fechada centrada na origem. O primeiro problema corresponde a achar o ponto de menor norma euclidiana de uma variedade linear. Também pode ser visto como a projeção ortogonal da origem O na variedade linear. A solução do problema é sempre única. O segundo problema significa encontrar o ponto da bola fechada de menor distância euclidiana a uma variedade linear, e o terceiro, a um ponto de uma bola fechada centrada na origem que minimiza um certo resíduo linear. Quando a

bola fechada e a variedade linear são disjuntas, os vetores posição das soluções dos problemas (P1) e (P2) são sempre paralelos, e há uma situação em que a solução do problema (P2) e do (P3) são iguais. Ao final, apresentamos um exemplo de quando as soluções dos problemas (P2) e (P3) coincidem e um de quando não coincidem.

Referências Bibliográficas

- [1] M. S. Bazaraa, H. D. Sherali, and C. M. Shetty. *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*. John Wiley, New York, 2nd edition, 1993.
- [2] E. G. Birgin and J. M. Martínez. Local convergence of an inexact-restoration method and numerical experiments. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 127:229–247, 2005.
- [3] J. F. Bonnans, J. C. Gilbert, C. Lemaréchal, and C. A. Sagastizábal. *Numerical Optimization: Theoretical and Practical Aspects*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [4] R. H. Byrd, J. C. Gilbert, and J. Nocedal. A trust region method based on interior point techniques for nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 89(1):149–185, 2000.
- [5] A. R. Conn, N. I. M. Gould, and P. L. Toint. *Trust-Region Methods*. MPS-SIAM Series on Optimization, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [6] R. Fletcher. *Practical Methods of Optimization*. John Wiley, New York, 2nd edition, 1990.
- [7] R. Fletcher and C. M. Reeves. Function minimization by conjugate gradients. *Computer Journal*, 7:149–154, 1964.
- [8] A. Friedlander. *Elementos de Programação não linear*. Unicamp, Campinas, 1994.
- [9] C. C. Gonzaga, E. W. Karas, and M. Vanti. A globally convergent filter method for nonlinear programming. *SIAM J. Optimization*, 14(3):646–669, 2003.
- [10] B. Kolman. *Introdução à Álgebra Linear com Aplicações*. LTC, Rio de Janeiro, 1999. Tradução de V. M. Iorio.

- [11] S. J. Leon. *Álgebra Linear com Aplicações*. LTC Editora, Rio de Janeiro, 4th edition, 1999. Tradução de V. M. Iorio.
- [12] D. G. Luenberger. *Linear and Nonlinear Programming*. Addison - Wesley Publishing Company, New York, 1986.
- [13] J. M. Martínez. Inexact-restoration method with Lagrangian tangent decrease and a new merit function for nonlinear programming. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 111:39–58, 2001.
- [14] J. M. Martínez and E. A. Pilotta. Inexact restoration algorithm for constrained optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 104:135–163, 2000.
- [15] J. M. Martínez and S. A. Santos. Métodos computacionais de otimização. 20.^o Colóquio Brasileiro de Matemática - IMPA, 1995.
- [16] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, 1999.
- [17] E. Polak. *Computational Methods in Optimization: A Unified Approach*. Academic Press, New York, 1971.
- [18] D. S. Watkins. *Fundamentals of Matrix Computations*. John Wiley, 1991.
- [19] W. I. Zangwill. *Nonlinear Programming: A Unified Approach*. Prentice-Hall, 1969.